

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Теоретическая и прикладная
физика

ВЫПУСК 3

2005

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО
ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ**

ФГУП

«Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ»

**ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ**

СЕРИЯ:

**Теоретическая и прикладная
физика**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 3

Издается с 1984 г.

Москва - 2005

Главный редактор Ю. А. Трутнев

Редакционная коллегия:

Е. Н. Аврорин – зам. главного редактора, В. Б. Адамский, М. В. Горбатенко,
В. Г. Заграфов, В. П. Копышев, Б. А. Надькто – зам. главного редактора, А. М. Певницкая –
ответственный секретарь, В. А. Симоненко, С. А. Холин

ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ИОНОВ В ПРОСТЫХ ВЕЩЕСТВАХ. III. МЕДЛЕННЫЕ ИОНЫ

Д. К. Ковшов
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Получена формула для коэффициента торможения медленного иона. Показано, что изотопические эффекты в электронных потерях энергии пренебрежимы при всех энергиях. Для полуэмпирической формулы потерь энергии установлена область адекватности и определена погрешность, которая составляет 2,4%.

Введение

Завершая аппроксимацию тормозной способности простых веществ [1, 2], мы переходим в область малых энергий и исследуем зависимость коэффициента торможения от вещества и частицы. Для аппроксимации используются данные из работ, перечисленных в табл. 1 [1].

Затем мы установим границы применимости полуэмпирической формулы потерь энергии и найдем ее погрешность.

Коэффициент торможения медленного иона

При изучении торможения медленных ионов, согласно общепринятому представлению, электронные потери энергии в этой области пропорциональны скорости: $S_3 = k_3 \sqrt{E}$. Здесь, как и в работах [1, 2], S_3 измеряется в эВ·см²/атом, E – в эВ/а.е.м.

Поведение k_3 в зависимости от вещества и частицы можно описать, взяв за основу формулу Линдхарда [6], модифицированную по Пичу, Хаузери и Нойвирту [27], и еще более обобщив ее:

$$k_3(Z_0, Z) = \frac{k_{30} Z_0^{p_{k0}} Z^{p_k}}{[g_0(Z_0) + g(Z)]^{q_k}}. \quad (1)$$

Здесь g_0 зависит от вещества, g – от частицы. Формула (1) обладает высокой степенью общности; все основные формулы потерь энергии медленных ионов можно получить из нее как частные случаи:

- формулу Ферми – Теллера [3] и ее модификацию по Линдхарду и Ритчи [4, 5] – при $p_{k0} = 0, p_k = 2, g(Z) = 0$;
- формулу Фирсова [7] – при $p_{k0} = p_k = 0, q_k = -1$;
- формулу Линдхарда [6] и ее модификацию по Пичу, Хаузери и Нойвирту [27] – при $p_{k0} = 1, p_k = 7/6, q_k = 3/2$.

Зависимость от массы иона должна была бы войти в параметр g . Однако у ионов-изотопов значения этого параметра оказались близки и могут с удовлетворительной точностью считаться равными. Поскольку (как

показано в работах [1, 2]) параметры $I_0, E_{гр}, E_{max}, S_{max}$ также не зависят от M , можно заключить, что изотопический эффект в электронных потерях энергии отсутствует при любой энергии; электронные потери определяются не энергией, а скоростью иона. Этот вывод подтверждается экспериментами [19, 22, 42, 43, 47, 48, 54, 59, 64, 68, 69, 75, 77–79].

Формула (1) обладает “избыточностью”: если ко всем g_0 прибавить одно и то же число G , а от всех g отнять это же число, то, очевидно, значения k_3 не изменятся. Они не изменятся также, если умножить все g_0 и g на одно и то же число C , а коэффициент k_{30} – на C^{q_k} ; благодаря этому можно без потери общности придать k_{30} любое фиксированное значение. Чтобы удобнее было сравнивать с формулой Линдхарда, положим

$$k_{30} = \frac{2\sqrt{2}\Sigma E}{v_B} = 0,1216 \cdot 10^{-15} \text{ эВ}^{1/2} \cdot \text{а.е.м.}^{1/2} \cdot \text{см}^2/\text{атом}.$$

Остальные параметры формулы (1) были найдены аппроксимацией экспериментальных данных. Показатели степени составляют $p_k \approx 1, p_{k0} \approx 1, q_k \approx 3/2$. Они вполне согласуются с формулой Линдхарда, если в ней множитель ξ_3 считать константой (вопреки традиционной формуле $\xi_3 \approx Z^{1/6}$ [6]), и расходятся с формулами Ферми – Теллера и Фирсова.

Параметры g_0 и g приведены в табл. 1 и 2 (в скобках даны значения, полученные интерполяцией). Они подвержены осцилляциям соответственно по Z_0 и по Z .

Максимумы g_0 (рис. 1) лежат при $Z_0 \approx 2; 10; 18; 29; 35; 47; 54; 72 \div 78$; минимумы – при $Z_0 \approx 4; 13 \div 14; 23 \div 24; 32; 42; 51; 57 \div 65$. Это согласуется с картиной периодичности потерь медленных ионов, полученной экспериментально [23, 39, 44, 49, 51, 60], компиляцией экспериментальных данных [31, 32, 36, 50] и численно [27–30, 33–35, 50, 57, 61, 71, 72]. (При сопоставлении было принято во внимание, что g_0 входит в знаменатель формулы (1), так что его максимумам соответствуют минимумы S и обратно.)

Параметр g_0 для веществ

Вещество	g_0
H ₂	2,42±0,20
He	4,07±0,20
Li	(3,67)
Be	1,22±0,21
B	(1,06)
C (аморф.)	2,01±0,06
N ₂	4,11±0,13
O ₂	5,1±1,4
F ₂	(7,14)
Ne	7,5±0,5
Na	(7,00)
Mg	5,4±2,0
Al	3,71±0,10
Si	3,85±0,22
P	(4,52)
S	(7,18)
Cl ₂	7,5±1,7
Ar	8,54±0,28
K	(8,46)
Ca	(7,89)
Sc	(6,83)
Ti	5,3±0,3
V	4,2±0,5
Cr	4,1±0,6
Mn	6,2±0,9
Fe	5,5±0,4
Co	6,5±0,5
Ni	7,52±0,25
Cu	8,61±0,24
Zn	7,1±0,4
Ga	(5,55)

Вещество	g_0
Ge	4,9±0,6
As	(8,62)
Se	13±6
Br ₂ (газ)	15,5±2,2
Kr	12,6±0,6
Rb	(11,90)
Sr	(9,64)
Y	12,2±8,1
Zr	7,5±0,8
Nb	7,5±0,5
Mo	6,6±0,6
Tc	(6,95)
Ru	(8,58)
Rh	(9,19)
Pd	8,8±0,7
Ag	9,56±0,24
Cd	(9,23)
In	10,6±1,3
Sn	9,1±2,1
Sb	6,2±0,7
Te	9,7±2,8
I ₂	(10,94)
Xe	11,8±1,1
Cs	(11,67)
Ba	(10,52)
La	9±4
Ce	(9,32)
Pr	(9,11)
Nd	9±3
Pm	(9,15)
Sm	(9,40)

Вещество	g_0
Eu	(9,80)
Gd	16,6±1,6
Tb	9±6
Dy	14±3
Ho	(11,88)
Er	12±5
Tm	(12,69)
Yb	(13,00)
Lu	16,2±1,5
Hf	11,3±0,8
Ta	13,1±0,7
W	12,9±0,9
Re	12,8±0,9
Os	(13,52)
Ir	18±5
Pt	12,5±0,9
Au	13,55±0,26
Hg	(12,61)
Tl	(12,22)
Pb	13,3±1,9
Bi	7,7±0,9

Таблица 2

Параметр g для ионов

Ион	g
H	0,97±0,15
He	1,75±0,12
Li	3,32±0,14
Be	2,91±0,24
B	2,47±0,17
C	2,78±0,12
N	2,48±0,10
O	3,17±0,13
F	3,96±0,15
Ne	4,96±0,15
Na	5,8±0,4
Mg	(6,76)
Al	6,8±0,5
Si	6,62±0,20
P	5,4±0,4
S	4,8±0,3
Cl	4,72±0,28
Ar	4,42±0,24
K	4,6±0,4
Ca	(4,83)

Ион	g
Sc	5,2±0,5
Ti	5,6±0,6
Cr	7,0±0,7
Mn	7,8±0,8
Fe	7,7±0,7
Co	9,2±0,9
Ni	(9,26)
Cu	8,8±0,6
Zn	(9,80)
Ga	(9,84)
Ge	11,3±1,0
As	10,7±1,1
Se	(9,02)
Br	8,2±0,5
Kr	8,7±0,8
Y	7,7±0,9
Ag	7,0±0,5
In	10,6±2,7
Sn	6±6
Sb	5±5

Ион	g
Te	4±3
I	7,3±0,4
Xe	8,3±0,8
Cs	3,3±1,6
Ba	5±4
La	5±4
Ce	6±5
Nd	13,4±2,0
Sm	16,1±2,6
Eu	6±6
Gd	5±4
Tb	9±9
Dy	12±5
Er	16±6
Ta	10,8±0,9
Au	13,1±0,8
Bi	13,8±2,6
U	15±4

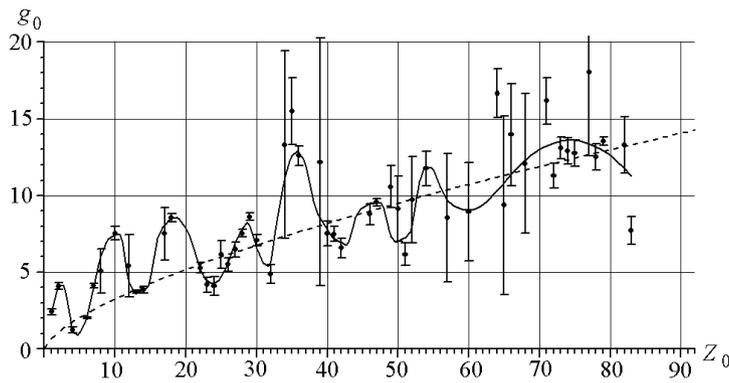


Рис. 1. Параметр g_0 для веществ — осцилляции (сглаженная кривая);
 - - - - - монотонная часть зависимости

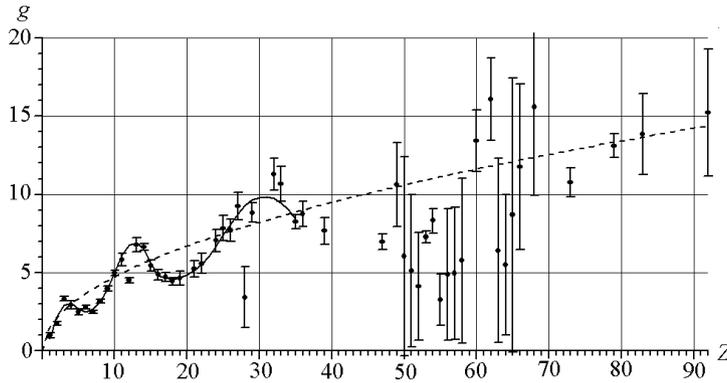


Рис. 2. Параметр g для ионов — осцилляции (сглаженная кривая);
 - - - - - монотонная часть зависимости

Осцилляции g_0 идут на фоне общего роста

$$g_0 \approx 0,7Z_0^{2/3}, \quad (2)$$

что очень близко к формуле Линдхарда, в которой $g_0 = Z_0^{2/3}$.

Параметр g (рис. 2) имеет максимумы при $Z \approx 3; 13 \div 14; 32$ и минимумы при $Z \approx 5 \div 7; 18$, в согласии с результатами экспериментов [7–14, 18, 21, 23, 36, 37, 56, 62], компилятивных работ [20, 55] и расчетов [15–17, 20, 24–26, 28, 34, 38, 40, 45, 52, 58, 63, 65, 70, 73, 74, 76]. При $Z > 36$ ход графика неясен из-за большого числа отсутствующих точек и больших погрешностей у остальных; для этих ионов интерполяция не проводилась.

Значения g для ионов Mg и Ni выпадают из гладкого хода кривой $g(Z)$. Наиболее вероятным объяснением служат систематические ошибки в работах [67] и [80]. Для обоих ионов в табл. 2 даны интерполированные значения.

Осцилляции g также сопровождаются общим ростом

$$g \approx 1,5\sqrt{Z}. \quad (3)$$

По формуле Линдхарда следовало бы ожидать $g = Z^{2/3}$. Впрочем, высокие погрешности g при больших Z не позволяют говорить о значимом расхождении.

Точность и адекватность формулы

Совокупность формул (1)–(5) статьи [1], (1), (2), (4), (5), статьи [2] и (1) настоящей статьи составляет

полуэмпирическую формулу потерь энергии. Если она не выходит за пределы разброса имеющихся экспериментальных данных, ее можно признать удовлетворительной и использовать в расчетах.

Разброс экспериментальных данных складывается из 1) случайной погрешности каждого отдельного измерения и 2) разброса между результатами разных экспериментальных работ, обусловленного систематическими погрешностями (которые благодаря большому числу анализируемых работ рандомизируются и тоже ведут себя как случайные). Первая составляющая характеризуется дисперсией “внутри статьи” σ_0^2 , вторая – дисперсией “между статьями” σ_1^2 .

Обе компоненты погрешности были изучены методом дисперсионного анализа (см. приложение) в зависимости от вещества, частицы и энергии. Чтобы более точно оценить их, данные были сгруппированы по энергии в 19 диапазонов: 0,7–1,4 кэВ/а.е.м.; 1,4–3,2 кэВ/а.е.м.; 3,2–7 кэВ/а.е.м.; 7–14 кэВ/а.е.м.; ...; 700–1400 МэВ/а.е.м.

Оказалось, что разброс внутри статей не зависит ни от Z_0 , ни от E и слабо растет с ростом Z . В среднем он составляет $\sigma_0 = 2,5\%$, что согласуется с авторскими оценками погрешности, лежащими обычно в пределах 2–5%.

Разброс между разными работами не зависит от Z_0 и Z , но сильно возрастает с убыванием энергии, доходя

до 37 % (при 1 кэВ/а.е.м.). При энергии 3 МэВ/а.е.м. и ниже он превышает σ_0 ; это обстоятельство отмечалось в работах [46, 48, 53, 66].

Для проверки адекватности был применен специально разработанный критерий (П.9). На рис. 3 показано отношение $S_{\text{неад}}^2/S_{\text{крит}}^2$ (при уровне значимости 1 %) в зависимости от Z и E . Там, где это отношение меньше единицы (светлые области), формула адекватна; превышение над единицей (темные области) свидетельствует о расхождении между формулой и экспериментом. Из рисунка видно, что основная доля расхождений приходится на тяжелые ионы малых и промежуточных энергий; этот район очерчен жирной линией. В остальной части диаграммы согласие в целом удовлетворительное.

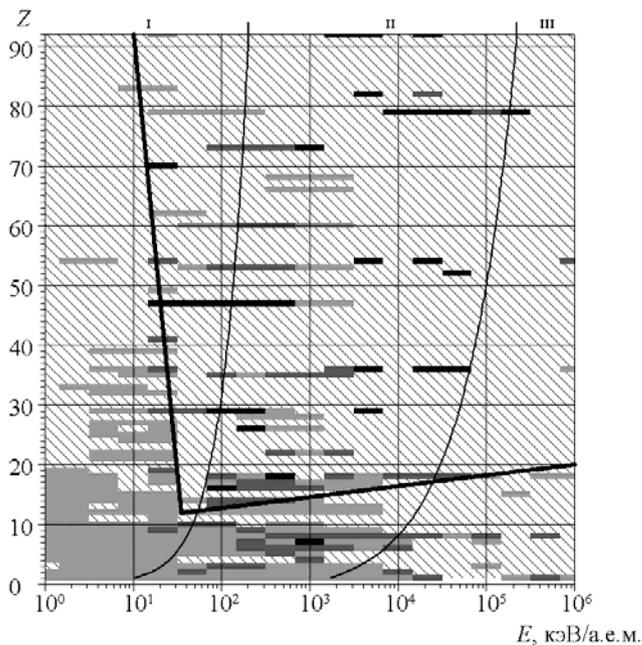


Рис. 3. Область адекватности формулы потерь энергии: — — — примерная граница области адекватности; — — — примерные границы характерных энергетических областей: I – медленные ионы, II – ионы промежуточных энергий, III – быстрые ионы. Штриховка указывает на отсутствие экспериментальных данных

Диаграмма ограничена энергией 1 кэВ/а.е.м. Ниже нее преобладают ядерные потери энергии, которые в данной работе не изучались.

Погрешность формулы (среднеквадратическое отклонение от неизвестного нам истинного значения) характеризуется величиной $\sigma_{\text{аппр}}$. В области адекватности она практически постоянна (рис. 4) и составляет $\sigma_{\text{аппр}} = 2,4\%$. Для сравнения на том же рисунке показана суммарная погрешность эксперимента $\sigma_{\text{эксп}} = \sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_1^2}$.

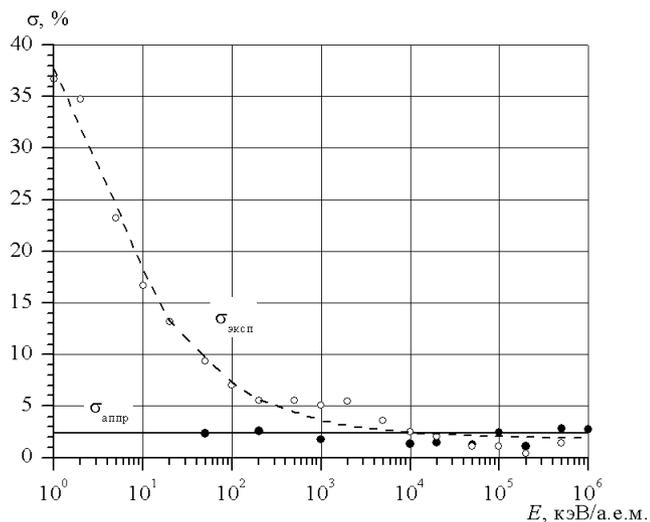


Рис. 4. Погрешности

Заключение

Итак, полученная формула позволяет находить электронные потери энергии с точностью 2,4 % в широком диапазоне условий: медленные ионы ($E = 1 \div 50$ кэВ/а.е.м.); легкие ионы промежуточных энергий ($Z \leq 12$, $E = 50 \div 1000$ кэВ/а.е.м.); легкие и средние быстрые ионы ($Z \leq 20$, $E = 10^3 \div 10^6$ кэВ/а.е.м.). В формулу входят четыре параметра (g_0 , $E_{\text{max}0}$, S'_{max} , I_0), зависящие от вещества, и один параметр (g), зависящий от частицы; таким образом, влияние вещества и влияние частицы полностью разделены. Это позволяет рассчитать потери энергии любой частицы в любом веществе, если только ранее были измерены потери энергии данной частицы в каком-либо веществе и потери энергии какой-либо частицы в данном веществе.

Попутно был установлен нижний предел применимости формулы Бете; изучена зависимость положения и величины максимума потерь от атомного номера частицы; сделан выбор между тремя теориями торможения медленной частицы (Ферми – Теллера, Фирсова и Линдхарда – Шарффа); подтверждено отсутствие изотопических эффектов.

Автор выражает благодарность сотрудникам научной библиотеки, и особенно В. А. Чулковой; без чьего содействия эта работа была бы невозможна; Ю. И. Соломатину за помощь в переводах с французского; К. Н. Ковшову за консультации по вопросам математической статистики.

Приложение

Статистическая процедура

Применяя модель компонент дисперсии при иерархической классификации [41], запишем относительную невязку $\delta = \ln(S_{\text{эксп}}/S_{\text{аппр}})$ в виде

$$\delta_{ijk} = -\Delta_i + A_{ij} + U_{ijk}, \quad i = 1, \dots, r, \quad j = 1, \dots, q_i, \quad k = 1, \dots, n_{ij}. \quad (\text{П. 1})$$

Здесь Δ_i – отклонение расчетного значения от истинного при i -й комбинации условий (вещество, частица, энергия); A_{ij} – погрешность j -й статьи при i -й комбинации условий; U_{ijk} – случайная ошибка отдельной экспериментальной точки. Величины Δ_i , A_{ij} , U_{ijk} считаем случайными, независимыми между собой, нормально распределенными с нулевым математическим ожиданием и дисперсиями $\sigma_{\text{анпр}}^2$, σ_1^2 , σ_0^2 соответственно.

В этой модели сумма квадратов распадается на составляющие

$$\sum_{i,j,k} \delta_{ijk}^2 = S_0^2 + S_1^2 + S_{\text{анпр}}^2; \quad (\text{П.2})$$

формулы для их расчета см. [41], с. 60. Они имеют математические ожидания

$$\mathbf{M}[S_0^2] = (n-q)\sigma_0^2; \quad (\text{П.3})$$

$$\mathbf{M}[S_1^2] = (q-r)\sigma_0^2 + (n-\varphi)\sigma_1^2; \quad (\text{П.4})$$

$$\mathbf{M}[S_{\text{анпр}}^2] = r\sigma_0^2 + \varphi\sigma_1^2 + n\sigma_{\text{анпр}}^2, \quad (\text{П.5})$$

где $n = \sum_{i,j} n_{ij}$ – общее число экспериментальных точек;

$q = \sum_i q_i$ – число комбинаций “условия + статья”; r –

число комбинаций условий; $\varphi = \sum_{i,j} (n_{ij}^2 / n_i)$.

Из (П.3)–(П.5) находим оценки дисперсий

$$\begin{aligned} \sigma_0^2 &= \frac{S_0^2}{n-q}; & \sigma_1^2 &= \frac{S_1^2 - (q-r)\sigma_0^2}{n-\varphi}; \\ \sigma_{\text{анпр}}^2 &= \frac{S_{\text{анпр}}^2 - r\sigma_0^2 - \varphi\sigma_1^2}{n}. \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

Построим для σ_0^2 и σ_1^2 доверительные интервалы (для σ_1^2 воспользуемся доверительным интервалом Уилльямса, см. [41], с. 30) с доверительной вероятностью $1-\alpha$, где α – уровень значимости

$$\sigma_{0 \min}^2 = \frac{S_0^2}{\chi_{n-q;1-\alpha/2}^2}; \quad \sigma_{0 \max}^2 = \frac{S_0^2}{\chi_{n-q;\alpha/2}^2}; \quad (\text{П.7})$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{1 \min}^2 &= \frac{q-r}{n-\varphi} \times \\ &\times \left[1 - F_{q-r;n-q;1-\alpha/4} \frac{S_0^2/(n-q)}{S_1^2/(q-r)} \right] \frac{S_1^2}{\chi_{q-r;1-\alpha/4}^2}; \\ \sigma_{1 \max}^2 &= \frac{q-r}{n-\varphi} \times \\ &\times \left[1 - F_{q-r;n-q;\alpha/4} \frac{S_0^2/(n-q)}{S_1^2/(q-r)} \right] \frac{S_1^2}{\chi_{q-r;\alpha/4}^2}. \end{aligned} \right\} (\text{П.8})$$

Здесь F и χ^2 – процентные точки F -распределения Фишера и распределения χ^2 .

На основе формулы (П.5) и доверительных интервалов (П.7), (П.8) можно предложить приближенный критерий для проверки адекватности аппроксимации. Если сумма квадратов $S_{\text{анпр}}^2$ превышает критическое значение

$$S_{\text{крит}}^2 = r\sigma_{0 \max}^2 + \varphi\sigma_{1 \max}^2, \quad (\text{П.9})$$

то наблюдается значимая неадекватность (при уровне значимости $\approx \alpha$).

Для исследования зависимости погрешностей от вещества, частицы и энергии нужно вычислять суммы квадратов (П.2) и вспомогательные суммы n , q , r , φ отдельно для каждого вещества (каждой частицы, каждого энергетического диапазона).

Список литературы

1. Ковшов Д. К. Потери энергии ионов в простых веществах. I. Быстрые ионы // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 1–2. С. 3–12.
2. Ковшов Д. К. Потери энергии ионов в простых веществах. II. Ионы промежуточных энергий // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 1–2. С. 13–19.
3. Fermi E., Teller E. // Phys.Rev.1947. Vol. 72, No. 5. P. 399–408.
4. Lindhard J. // Dan.Mat.Fys.Medd. 1954. Bd. 28, nr. 8.
5. Ritchie R. H. // Phys. Rev. 1959. Vol. 114, No. 3. P. 644–654.
6. Lindhard J., Scharff M. // Phys. Rev. 1961. Vol. 124, No. 1. P.128–130.
7. Теплова Я. А., Николаев В. С., Дмитриев И. С., Фатева Л. Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. Вып. 1. С. 44–60.
8. Ormrod J. H., Duckworth H. E. // Can. J. Phys. 1963. Vol. 41, No.9. P. 1424–1442.
9. Ormrod J. H., Macdonald J. R., Duckworth H. E. // Can. J. Phys. 1965. Vol. 43, No. 2. P. 275–284.
10. Fastrup B., Hvelplund P., Sautter C.A. // Dan. Mat. Fys. Medd. 1966. Bd. 35, nr. 10.
11. Eriksson L., Davies J.A., Jespersgaard P. // Phys. Rev. 1967. Vol. 161, No.2. P. 219–234.
12. Fastrup B., Borup A., Hvelplund P. // Can. J. Phys. 1968. Vol. 46, No. 6. P. 489–495.
13. Ormrod J. H. // Can. J. Phys. 1968. Vol. 46, No. 6. P. 497–502.
14. Eisen F. N. // Can. J. Phys. 1968. Vol. 46, No. 6. P. 561–572.
15. Winterbon K. B. // Can. J. Phys. 1968. Vol. 46, No. 21. P. 2429–2433.
16. Cheshire I. M., Dearnaley G., Poate J. M. // Phys. Lett. A. 1968. Vol. 27, No. 5. P. 304–305.
17. Bhalla C. P., Bradford J. N. // Phys. Lett. A. 1968. Vol. 27, No. 5. P. 318–319.

18. Hvelplund P. , Fastrup B. // *Phys.Rev.* 1968. Vol. 165, No. 2. P. 408–414.
19. Andersen H. H., Simonsen H., Sorensen H., Vajda P. // *Phys. Rev.* 1969. Vol. 186, No. 2. P. 372–375.
20. Cheshire I. M., Dearnaley G., Poate J. M. // *Proc. Roy. Soc. A.* 1969. Vol. 311, No. 1504. P. 47–51.
21. Bottiger J., Bason F. // *Radiat.Eff.* 1969. Vol. 2. P. 105.
22. Bernstein W., Cole A.J., Wax R.L. // *Nucl. Instr. Meth.* 1970. Vol. 90. P. 325–328.
23. Hvelplund P. // *Dan. Mat. Fys. Medd.* 1971. Bd. 38, nr. 4.
24. Komarov F. F., Kumakhov M. A. // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1973. Vol. 58, No. 1. P. 389–400.
25. Kanaya K., Hojou K. // *Japan. J. Appl. Phys.* 1974. Vol. 13, No. 3. P. 393–399.
26. Briggs J. S., Pathak A. P. // *J. Phys. C.* 1974. Vol. 7, No. 11. P. 1929–1936.
27. Pietsch W., Hauser U., Neuwirth W. // *Nucl. Instr. Meth.* 1976. Vol. 132. P. 79–87.
28. Land D. J., Brennan J. G. // *Nucl. Instr. Meth.* 1976. Vol. 132. P. 89–93.
29. Latta B. M., Scanlon P. J. // *Phys. Rev. A.* 1976. Vol. 13, No. 4. P. 1370–1380.
30. Latta B.M., Scanlon P. J. // *Phys.Stat.Sol.(b).* 1976. Vol. 74, No. 2. P. 711–719.
31. Andersen H. H., Ziegler J. F. *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements. (The Stopping and Ranges of Ions in Matter. Vol. 3.)* N. Y.: Pergamon Press, 1977.
32. Ziegler J. F. *Helium: Stopping Powers and Ranges in All Elemental Matter. (The Stopping and Ranges of Ions in Matter. Vol. 4.)* N. Y.: Pergamon Press, 1977.
33. Land D. J., Brennan J. G., Simons D. G., Brown M. D. // *Phys. Rev. A.* 1977. Vol. 16, No. 2. P. 492–499.
34. Land D. J., Brennan J. G. // *At. Data Nucl. Data Tables.* 1978. Vol. 22, No. 3. P. 235–247.
35. Neuwirth W., Pietsch W., Kreutz R. // *Nucl. Instr. Meth.* 1978. Vol. 149, No. 1–3. P. 105–113.
36. Mertens P. // *Nucl. Instr. Meth.* 1978. Vol. 149, No. 1–3. P. 149–153.
37. Ward D., Andrews H. R., Mitchell I.V. et al. // *Can. J. Phys.* 1979. Vol. 57, No. 5. P. 645–656.
38. Cruz S. A., Vargas C., Brice D. K. // *Nucl. Instr. Meth.* 1980. Vol. 170, No. 1–3. P. 205–207.
39. Geissel H., Armbruster P. , Kitahara T. et al. // *Nucl. Instr. Meth.* 1980. Vol. 170, No. 1–3. P. 217–219.
40. Pathak A. P. // *Phys. Rev. B.* 1980. Vol. 22, No. 1. P. 96–98.
41. Джонсон Н., Лион Ф. *Статистика и планирование эксперимента в технике и науке: Методы планирования эксперимента: Пер. с англ. М.: Мир, 1981.*
42. Santry D. C., Werner R. D. // *Nucl. Instr. Meth.* 1981. Vol. 188, No. 1. P. 211–216.
43. Astner G., Mannervik S., Veje E. // *Nucl. Instr. Meth.* 1981. Vol. 188, No. 2. P. 475–476.
44. Geissel H., Laichter Y., Schneider W. F. W., Armbruster P. // *Nucl. Instr. Meth.* 1982. Vol. 194, No. 1–3. P. 21–29.
45. Pathak A. P. // *Nucl. Instr. Meth.* 1982. Vol. 194, No. 1–3. P. 31–34.
46. Bichsel H., Porter L. E. // *Phys. Rev. A.* 1982. Vol. 25, No. 5. P. 2499–2510.
47. Conradie J., Lombaard J. M., Friedland E. // *Nucl. Instr. Meth.* 1983. Vol. 205, No. 1–2. P. 359–363.
48. Semrad D., Bauer P. , Aumayr F. et al. // *Nucl. Instr. Meth.* 1983. Vol. 218, No. 1–3. P. 811–816.
49. Fink D., Biersack J. P. , Stadlele M. et al. // *Nucl. Instr. Meth.* 1983. Vol. 218, No. 1–3. P. 817–820.
50. Cruz S. A., Vargas–Aburto C., Brice D.K. et al. // *Phys.Rev. A.* 1983. Vol. 27, No. 5. P. 2403–2420.
51. Ribas R. V., Seale W. A., Rao M. N. // *Phys. Rev. A.* 1983. Vol. 28, No. 6. P. 3234–3237.
52. Puska M. J., Nieminen R. M. // *Phys. Rev. B.* 1983. Vol. 27, No. 10. P. 6121–6128.
53. Bauer P., Aumayr F., Semrad D., Scherzer B. M.U. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1984. Vol. 1, No. 1. P. 1–8.
54. Bauer P., Semrad D., Golser R. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1984. Vol. 2, No. 1–3. P. 149–152.
55. Xia Yue-yuan, Tan Chun-yu // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 13, No. 1–3. P. 100–106.
56. Lennard W. N., Geissel H., Jackson D. P., Phillips D. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 13, No. 1–3. P. 127–132.
57. Nagy I., Laszlo J., Giber J. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 15, No. 1–6. P. 8–10.
58. Ashley J. C., Ritchie R. H., Echenique P. M., Nieminen R. M. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 15, No. 1–6. P. 11–13.
59. Mertens P., Bauer P., Semrad D. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 15, No. 1–6. P. 91–95.
60. Dickstein P. , Ingman D., Shafirir N.H. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 15, No. 1–6. P. 109–113.
61. Kaneko T. // *Phys. Rev. A.* 1986. Vol. 33, No. 3. P. 1602–1611.
62. Lennard W. N., Geissel H. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1987. Vol. 27, No. 2. P. 338–343.
63. Arnau A., Echenique P. M., Ritchie R.H. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1988. Vol. 33, No. 1–4. P. 138–141.
64. Ogino K., Kiyosawa T., Kiuchi T. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1988. Vol. 33, No. 1–4. P. 155–157.
65. Nagy I., Arnau A., Echenique P. M. // *Phys. Rev. A.* 1989. Vol. 40, No. 2. P. 987–994.
66. Bauer P. // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1990. Vol. 45, No. 1–4. P. 673–683.
67. Arstila K., Keinonen J., Tikkanen P. // *Phys. Rev. B.* 1990. Vol. 41, No. 10–A. P. 6117–6123.

68. Price J. L., Stern S. H., Simons D. G. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1991. Vol. 56/57, Pt. I. P. 348–351.
69. Golser R., Semrad D. // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 66, No. 14. P. 1831–1833.
70. Penalba M., Arnau A., Echenique P. M. // Nucl. Instr. Meth. B. 1992. Vol. 67. P. 66.
71. Kaneko T. // At. Data Nucl. Data Tables. 1993. Vol. 53, No. 2. P. 271–340.
72. Cui N., Wang Y.-N., Ma T.-C. // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. Vol. 73, No. 2. P. 123–129.
73. Xia Yueyuan, Tan Chunyu, Hu Xierong, Mei Liangmo // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. Vol. 82, No. 4. P. 513–517.
74. Cruz S. A., Soullard J., Cabrera-Trujillo R. // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. Vol. 83, No. 1–2. P. 5–14.
75. Price J. L., Simons D. G., Stern S. H. et al. // Phys. Rev. A. 1993. Vol. 47, No. 4-B. P. 2913–2918.
76. Calera-Rubio J., Gras-Marti A., Arista N. R. // Nucl. Instr. Meth. B. 1994. Vol. 93, No. 2. P. 137–141.
77. Leblanc L., Ross G. G., Wallace W. E. // Nucl. Instr. Meth. B. 1995. Vol. 95, No. 4. P. 457–462.
78. Eppacher Ch., Diez Muino R., Semrad D., Arnau A. // Nucl. Instr. Meth. B. 1995. Vol. 96, No. 3–4. P. 639–642.
79. Ribas R.V., Medina N. H., Rao M. N. et al. // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 51, No. 3. P. 2634–2636.
80. Harikumar V., Pathak A. P., Nath N. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1997. Vol. 129, No. 2. P. 143–146.

Статья поступила в редакцию 31.01.2005

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ШИРИНЫ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ НА МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНАХ

А. А. Садовой, А. С. Ульянов
РФЯЦ-ВНИИЭФ

С использованием формализма функции Грина дан вывод интегрального уравнения Шредингера, описывающего рассеяние электронов на многоэлектронных ионах. С использованием "диагонализационного" приближения в квадратичном по взаимодействию приближении получено аналитическое выражение для резонансной части амплитуды рассеяния. На основе ее анализа получено аналитическое выражение для ширины автоионизационных состояний. Развита техника расчета многоэлектронных матричных элементов с включенными волновыми функциями непрерывного спектра рассеиваемого электрона, входящих в аналитические формулы для ширины и смещения резонанса. Аналитически исследована роль обменных эффектов при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах, для чего волновые функции компанд-состояния рассчитывались методом многомерных угловых кулоновских функций, обеспечивающим высокое качество волновой функции.

Представлены в качестве примера развитого формализма результаты численных расчетов ширины 2^1P резонанса в рассеянии электрона на водородоподобном ионе гелия.

Введение

Данные об элементарных процессах, происходящих при столкновении электронов с ионами и нейтральными атомами, находят широкое применение в современной физике и новой технике: в физике плазмы, лазерной технике, термоядерных исследованиях, квантовой химии, астрофизике, физике ядерных реакций с тяжелыми ионами и др. Один из способов накачки газовых лазеров базируется на процессах возбуждения атомов и ионов электронным ударом. В астрофизике многие наблюдаемые эмиссионные линии связаны с возбуждением положительно заряженных ионов электронным ударом. Во всех этих процессах важную роль играют автоионизационные состояния (АИС), т. е. квазистационарные состояния в системе налетающий электрон – мишень. Эти состояния являются атомными аналогами компанд-состояний в ядерной физике.

В результате столкновений ионов с атомами в плазме происходит возбуждение АИС многозарядных ионов, что влияет на энергетический баланс плазмы. Кроме того, эти процессы используются для диагностики параметров плазмы. Первым экспериментально зарегистрированным около 40 лет назад был S -резонанс при упругом рассеянии электронов на гелии, который был обнаружен на 0,5 эВ ниже порога $2S$ гелия [1]. Широкие экспериментальные исследования резонансных явлений при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах начались в 60-х годах прошлого столетия. Последнее

было обусловлено достижением разрешающей способности электростатических анализаторов в несколько десятков милливольт при токах измерения $\sim 10(-7)$ А и появлением источников излучения непрерывного спектра, синхротронного излучению ускорителей.

Теоретическое осмысление экспериментальных данных началось с работы Уго Фано [2], в которой было показано, что интерференция дискретного АИС с прилегающим континуумом приводит к резонансам в сечениях упругого рассеяния и возбуждения. Однако проведение теоретических исследований было связано с выполнением большого объема вычислений. Поэтому доведение теоретических работ до конкретного смысла стало возможным лишь с появлением современных быстродействующих ЭВМ. Однако и до последнего времени при теоретическом описании резонансных явлений при рассеянии электронов на ионах используются многочисленные приближения, часто трудно контролируемые. Поэтому представляются целесообразными поиски новых методов теоретического описания резонансных явлений при рассеянии электронов на многозарядных ионах, базирующихся на многоэлектронной теории атома. В данной работе предложен новый метод расчета ширин автоионизационных состояний и приведены результаты методических численных расчетов.

За плодотворные обсуждения различных результатов работы авторы выражают благодарность Жмайло В. А., Рыбаченко В. Ф., Дзюбе Б. М., Повышеву В. М.

1. Интегральное уравнение для рассеяния электронов и его решение

Для описания двухчастичных каналов рассеяния будем исходить из уравнения Шредингера

$$\{H_1 + H_2 + V - E\} \Psi = 0, \quad (1.1)$$

где H_1 и H_2 – гамильтонианы сталкивающихся частиц; V – потенциальная энергия взаимодействия этих же частиц; E – полная энергия всей системы. Если определить следующим образом функцию Грина этих частиц без взаимодействия

$$(H_1 + H_2 - E)G_0 = I, \quad (1.2)$$

то можно переписать исходное уравнение Шредингера в интегральной форме уравнения Липмана – Швингера

$$\Psi = \Psi_0 - G_0 V \Psi. \quad (1.3)$$

Если считать взаимодействие малым, то, используя связь

$$G_0 = G + G_0 V G, \quad (1.4)$$

можно получить приближенное выражение для волновой функции (ВФ) Ψ

$$\Psi \approx \Psi_0 - G V \Psi. \quad (1.5)$$

Решая уравнение (1.3) методом итераций, подставляя в правую часть его выражение (1.5), получим следующее интегральное уравнение Шредингера:

$$\Psi \approx \Psi_0 - G_0 V (\Psi_0 - G V \Psi). \quad (1.6)$$

Для описания резонансного рассеяния электронов рассмотрим некоторые решения данного уравнения, с этой целью воспользуемся спектральным представлением функции Грина системы

$$G(A, A') = \sum_{\lambda} \frac{\Phi_{\lambda}(A) \Phi_{\lambda}(A')}{E_{\lambda} - E}, \quad (1.7)$$

где Φ_{λ} – ВФ АИС. Отметим, что суммирование в последней формуле подразумевает и интегрирование по непрерывному спектру. Подставим выражение (1.7) в (1.6) и перепишем в виде

$$\Psi = J_0 + G_0 V \sum_{\lambda} \Phi_{\lambda} \frac{C_{\lambda}}{E_{\lambda} - E}, \quad (1.8)$$

где введены следующие обозначения:

$$C_{\lambda} = \langle \Phi_{\lambda} V \Psi \rangle, \quad J_0 = \Psi_0 - G_0 V \Psi_0. \quad (1.9)$$

После подстановки (1.8) в выражение для C_{λ} в (1.9) получим систему алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов

$$C_{\lambda} = \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle + \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} \frac{\langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda'} \rangle}{E_{\lambda'} - E}. \quad (1.10)$$

Далее воспользуемся приближенным решением этой системы, которое назовем “диагонализационным” [3]. Это решение получается, если пренебречь недиагональными членами в рассматриваемой системе алгебраических уравнений, что позволяет приближенно записать

$$C_{\lambda} \approx \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle \left\{ 1 + \frac{\langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle}{E_{\lambda} - E} \right\}^{-1}. \quad (1.11)$$

Следует отметить, что диагонализационное приближение справедливо при малых энергиях налетающего электрона, когда можно пренебречь связью каналов.

В итоге, подставляя (1.11) в (1.8) и используя (1.9), получим представление для ВФ всей системы

$$\Psi = \Psi_0 - G_0 V \Psi_0 + \sum_{\lambda} \frac{\langle G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle}{E_{\lambda} - E - \langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle}. \quad (1.12)$$

Первое слагаемое в этой формуле соответствует потенциальному рассеянию, второе – борн-кулоновскому рассеянию [4], третье слагаемое описывает резонансные эффекты.

Для последующих расчетов амплитуд рассеяния, положения и ширины компаунд-резонанса необходимо получить явный вид асимптотики функции Грина.

Функция Грина для совокупности невзаимодействующих систем определяется уравнением

$$\left(H(\vec{\xi}) + H(\vec{r}) - E \right) G(\vec{\xi}, \vec{r}; \vec{\xi}', \vec{r}') = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.13)$$

Для ее нахождения воспользуемся полной системы функций соответствующего уравнения

$$\left(H(\vec{\xi}) + H(\vec{r}) - E \right) \Phi_\lambda(\vec{\xi}, \vec{r}) = 0, \quad (1.14)$$

решение которого можно искать в виде

$$\Phi_\lambda(\vec{\xi}, \vec{r}) = \varphi_\lambda(\vec{\xi}) \Psi_k(\vec{r}), \quad (1.15)$$

где φ_λ – ВФ мишени; Ψ_k – ВФ налетающего электрона. Учитывая определение ВФ мишени

$$\left(H(\vec{\xi}) - \varepsilon_\lambda \right) \varphi(\vec{\xi}) = 0, \quad (1.16)$$

последнее уравнение можно преобразовать к виду

$$\left(H(\vec{r}) - E + \varepsilon_\lambda \right) \Psi_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}) = 0. \quad (1.17)$$

Уравнение непрерывного спектра имеет два линейно независимых решения, одно удовлетворяет условию конечности в нуле, а второе имеет расходящуюся волну на бесконечности. Следовательно, в соответствии с определением функции Грина можно записать

$$G(\vec{\xi}, \vec{r}; \vec{\xi}', \vec{r}') = \begin{cases} -\sum_{\lambda} \frac{1}{k_\lambda} \varphi_\lambda(\vec{\xi}) u_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}') v_k(\vec{r}') & \text{при } r < r'; \\ -\sum_{\lambda} \frac{1}{k_\lambda} \varphi_\lambda(\vec{\xi}) v_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}') u_k(\vec{r}') & \text{при } r > r'. \end{cases} \quad (1.18)$$

При наличии кулоновского взаимодействия для построения функции Грина необходимо использовать решения радиального уравнения Шредингера с асимптотиками

$$u_l(r) \sim \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l\right); \quad (1.19)$$

$$v_l(r) \sim \cos\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l\right), \quad (1.20)$$

где δ_l – кулоновская фаза. Используя приведенные функции, для радиальной части функции Грина можно записать выражение

$$g_{kl}(r, r') = \begin{cases} -\frac{1}{k} [u_l(kr) v_l(kr') + i u_l(kr) u_l(kr')], & r \leq r'; \\ -\frac{1}{k} [u_l(kr') v_l(kr) + i u_l(kr) u_l(kr')], & r \geq r', \end{cases} \quad (1.21)$$

где радиальная часть функции Грина $g_{kl}(r, r')$ определяется из выражения

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{lm} \frac{g_l(r, r')}{rr'} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega). \quad (1.22)$$

Для нахождения асимптотики радиальной части функции Грина при $r > r'$, исходя из приведенного выше выражения, можно записать

$$g_{kl}(r, r') = -\frac{1}{k} u_l(kr') [v_l(kr) + i u_l(kr)] = -\frac{1}{k} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} u_l(kr'). \quad (1.23)$$

При выводе последнего выражения использована формула Муавра и асимптотические формулы для регулярного и нерегулярного решений кулоновской задачи. Если далее учесть явный вид полной функции Грина, то можно получить

$$G(r, r') = \frac{1}{kr} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega') e^{i\delta_l - \frac{\pi l}{2}} \frac{u_l(kr')}{r'}. \quad (1.24)$$

Теорема сложения сферических функций позволяет упростить это выражение

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{kr} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{4\pi} P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{r}'}{rr'}\right) \frac{u_l(kr')}{r'}. \quad (1.25)$$

Принимая во внимание определение ВФ непрерывного спектра

$$\Psi_k^-(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{4\pi} P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{r}'}{rr'}\right) \frac{u_l(kr)}{kr}, \quad (1.26)$$

последнее выражение для асимптотики функции Грина можно записать так

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{r} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \left(\Psi_k^-(\vec{r}')\right)^*. \quad (1.27)$$

2. Возбуждение 2^1P резонанса при упругом рассеянии электрона на водородоподобном гелии

ВФ компаунд-состояния $\text{He}^+ + e^-$ является решением уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - E \right\} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = 0. \quad (2.1)$$

Будем искать решение этого уравнения в рамках метода многомерных угловых кулоновских функций МУКФ [5] в виде ряда по амплитудам $X_{K_V}(\rho)$

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = \sum_{K_V} \frac{X_{K_V}(\rho)}{\rho^{\frac{5}{2}}} U_{K_V}(\Omega, \mu), \quad (2.2)$$

где многомерные угловые функции $U_{K_V}(\Omega, \mu)$ определяются так

$$U_{K_V}(\Omega) = \sum_{j_z1 j_z2} \langle j_1 j_{z1} j_2 j_{z2} | J J_z \rangle \sum_{i=1}^j \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \frac{1}{\rho^{K_i}} \begin{vmatrix} \varphi_{\omega_1}(1) & \varphi_{\omega_1}(2) \\ \varphi_{\omega_2}(1) & \varphi_{\omega_2}(2) \end{vmatrix}, \quad (2.3)$$

где $\rho = r_1 + r_2$ – коллективная переменная; $\varphi_{\omega_i}(k) \equiv \varphi_{n_i l_i j_i j_{z_i}}(\vec{r}_k) = \frac{r_k^{n_i}}{\sqrt{\Gamma(2n_i + 2l_i + 3)}} \sum_{m_i} \langle l_i m_i \frac{1}{2} \mu_i | j_i j_{z_i} \rangle Y_{l_i m_i}(\vec{r}_k) \chi_{\frac{1}{2} \mu_i}$

базисные функции; $Y_{l_i m_i}(\vec{r}) = r^{l_i} Y_{l_i m_i}(\Omega)$; K_i – степень полинома $P(\varphi_{\omega_i}(\vec{r}_k)) = \begin{vmatrix} \varphi_{\omega_1}(1) & \varphi_{\omega_1}(2) \\ \varphi_{\omega_2}(1) & \varphi_{\omega_2}(2) \end{vmatrix}$.

Из анализа угловой части МЭ можно найти допустимые значения углового момента налетающего электрона, обеспечивающего формирование компаунд-состояния с заданным моментом.

Ниже будет рассмотрено возбуждение 2^1P резонанса при рассеянии электрона на водородоподобном гелии. Для этого состояния двухчастичные квантовые числа равны $S = 0$ $L = 1$ $J = 1$.

Исходя из правил отбора, следует, что для орбитального момента l и полного механического момента j_3 налетающего электрона допустимо только

$$l = 1, \quad j_3 = \frac{1}{2}. \quad (2.4)$$

Основное состояние водородоподобного иона гелия – это $1S$ с энергией $E_0 = 2$ ат.ед. Расчетное значение энергии связи компаунд-состояния 2^1P $E_\lambda \approx -1,692$ ат. ед. = 46 эВ [5]. Следует отметить, что это значение с точностью до сотых долей процента согласуется с данными, приведенными в [6]. Следовательно, возбуждение этого резонанса возможно при энергии налетающего электрона

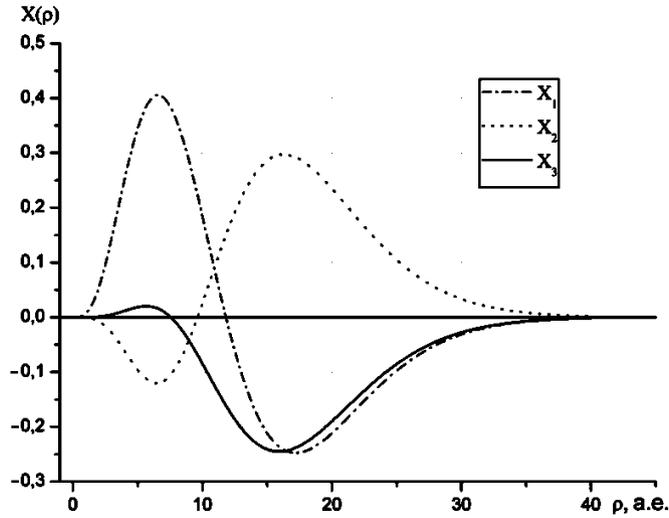
$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} k_0^2 = E_\lambda - E_0 = 8,2 \text{ эВ}. \quad (2.5)$$

Волновое число рассеиваемого электрона (в ат. ед.)

$$k = \frac{Z}{\sqrt{2\varepsilon}}. \quad (2.6)$$

В разложении ВФ компаунд-состояния (2.2) будем учитывать первые три амплитуды X_{K_V} разложения, причем амплитуде X_1 соответствует одночастичное возбуждение $1s \rightarrow 1p$, амплитуде X_2 – двухчастичное возбуждение $1s \rightarrow 1p, 1s \rightarrow 2s$, амплитуде X_3 – двухчастичное возбуждение $1s \rightarrow 2s, 1s \rightarrow 2p$. Решая систему дифференци-

альных уравнений 2-го порядка для указанных амплитуд разложения ВФ компаунд-состояния, получим вид этих амплитуд (см. рисунок).



Амплитуды разложения ВФ компаунд-состояния 2^1P^-

3. Метод расчета ширины резонанса компаунд-состояния

Для нахождения выражения для ширины резонанса компаунд-состояния необходимо найти явный вид асимптотики третьего слагаемого знаменателя ВФ системы

$$\Psi = J_0 + \frac{\langle G_0 V \Phi_\lambda | \Phi_\lambda V \Psi_0 \rangle}{E - E_\lambda - \langle \Phi_\lambda V G_0 V \Phi_\lambda \rangle}, \quad (3.1)$$

где оператор потенциальной энергии равен

$$V = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{r_1}. \quad (3.2)$$

Учитывая явный вид многочастичной функции Грина, можно записать

$$\frac{\Gamma}{2} = \langle \Phi_\lambda V | \text{Im } G_0 | V \Phi_\lambda \rangle = \frac{1}{k} \sum_{lm} \langle \Phi_\lambda V \varphi(1) v_{lm}(2) \rangle \langle \varphi(1) v_{lm}(2) V \Phi_\lambda \rangle = \frac{1}{k} \sum_{lm} |M_2^{lm}|^2, \quad (3.3)$$

где определен характерный многоэлектронный матричный элемент

$$M_2^{lm} = \langle \Phi_\lambda V \varphi(1) v_{lm}(2) \rangle. \quad (3.4)$$

Как уже упоминалось, при возбуждении 2^1P резонанса в рассеянии электрона на водородоподобном гелии допустимо одно значение $l = 1$. Следовательно, в этом случае

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{1}{k} |M_2^{l=1}|^2. \quad (3.5)$$

Для упрощения численных расчетов ширины компаунд-резонанса рассмотрим следующий матричный элемент:

$$M_l = \sum_{m\mu_3 j_{z1}} \left\langle j_1 j_{z1} \frac{1}{2} \mu_3 \left| J J_z \right. \right\rangle \left\langle l m \frac{1}{2} \mu_3 \left| j_3 j_{z3} \right. \right\rangle \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{u_l(kr_2)}{r_2} Y_{lm}(\Omega_2) \varphi(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Phi_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (3.6)$$

где l – орбитальный момент налетающего электрона; m – проекция этого момента на выделенное направление; $\frac{1}{2}$ и μ_3 – спин и его проекция соответственно; j_3, j_{z3} – полный механический момент и его проекция. Непосредственное интегрирование при замене переменных

$$r = r_1 + r_2, \quad r_1 = r \sin \theta, \quad r_2 = r(1 - \sin \theta) \quad (3.7)$$

дает следующее выражение для матричного элемента M_l :

$$M_l = \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}} \sum_{K_\nu i=1}^j \Delta_{K_\nu i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i+6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1+1)\Gamma(n_2+1)}{\Gamma(n_1+2l_1+3)\Gamma(n_2+2l_2+3)}} \sum_{p_1=0}^{m_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \left(Y^d H_{l p_1 p_2}^d - Y^{ex} H_{l p_1 p_2}^{ex} \right), \quad (3.8)$$

где Y^d и Y^{ex} – угловые части МЭ для прямого и обменного взаимодействий соответственно; $\Delta_{K_\nu i}$, β_{nl}^p – численные коэффициенты, полученные в результате перехода к ортонормированному базису многомерных угловых функций (см. [5]).

При вычислении данного матричного элемента столкнемся с двумя различными случаями. Рассмотрим сначала случай, когда $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$. Тогда, сделав замену переменных $\sin \theta = x$, $y = \frac{r}{\rho}$, получим

$$H_{l p_1 p_2}^d = \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \times \left[\int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2 - l_1} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_1 + 1} (1-x)^{l_1 + p_2 + l_2 + 1} dx \right]. \quad (3.9)$$

Если же $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$, то выражение для $H_{l p_1 p_2}^d$ выглядеть будет так

$$H_{l p_1 p_2}^d = \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \times \left[\int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2 - l_1} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_1 + 1} (1-x)^{l_1 + p_2 + l_2 + 1} dx \right], \quad (3.10)$$

Сделав аналогичные вычисления для слагаемых, отвечающих обменному взаимодействию, получим выражения для $H_{l p_1 p_2}^{ex}$

$$H_{l p_1 p_2}^{ex} = \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \times \left[\int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_2 + p_2 + 2} (1-x)^{p_1 + l_1 - l_2} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_2 + 1} (1-x)^{l_2 + p_1 + l_1 + 1} dx \right], \quad (3.11)$$

когда $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$;

$$H_{l p_1 p_2}^{ex} = \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \times \left[\int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_2 + p_2 + 2} (1-x)^{p_1 + l_1 - l_2} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_2 + 1} (1-x)^{l_2 + p_1 + l_1 + 1} dx \right], \quad (3.12)$$

когда $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$.

При расчете ширины резонанса необходимо учесть влияние экранировки заряда ядра. Согласно (3.2), это приводит к дополнительному слагаемому ΔM_l , выражение для которого имеет вид

$$\Delta M_l = \left\langle lm \frac{1}{2} \mu_3 \left| j_3 j_{z3} \right. \right\rangle \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{u_l(kr_2)}{r_2} Y_{lm}(\Omega_2) \Phi(\vec{r}_1) \frac{1}{r_2} \Phi_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (3.13)$$

Следует отметить, что

$$\Delta M_l = \Delta M^d + \Delta M^{ex}, \quad (3.14)$$

где первое и второе слагаемые определяют соответственно прямое и обменное взаимодействия. Выражения для этих величин получены непосредственным интегрированием и выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta M^d = & -\delta_{JJ_z}^{J_1 J_2} \delta_0^{l_1} \delta_l^{l_2} \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{2} \sum_{K_v}^j \Delta_{K_v i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1 + 1)\Gamma(n_2 + 1)}{\Gamma(n_1 + 2l_1 + 3)\Gamma(n_2 + 2l_2 + 3)}} \times \\ & \times \sum_{p_1=0}^{n_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_v}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \times \\ & \times \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2} dx, \end{aligned} \quad (3.15)$$

когда $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$;

$$\begin{aligned} \Delta M^d = & -\delta_{JJ_z}^{J_1 J_2} \delta_0^{l_1} \delta_l^{l_2} \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{2} \sum_{K_v}^j \Delta_{K_v i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1 + 1)\Gamma(n_2 + 1)}{\Gamma(n_1 + 2l_1 + 3)\Gamma(n_2 + 2l_2 + 3)}} \times \\ & \times \sum_{p_1=0}^{n_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \int_0^\infty X_{K_v}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) \cdot x^{l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2} dx, \end{aligned} \quad (3.16)$$

когда $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$.

Учитывая начальные и конечные состояния многоэлектронной ВФ мишени, получаем, что $\Delta M^{ex} = 0$, так как $l_2 = 0$, а в выражении ΔM^{ex} содержится множитель $\delta_0^{l_2}$. Далее приведем расчетные данные для матричных элементов M^d , M^{ex} , ΔM^d и ширины, которая определяется выражением (3.5). Из представленных в табл. 1 расчетов видно, что наибольший вклад в ширину компаунд-резонанса вносит первая амплитуда в разложении ВФ компаунд-состояния. Таким образом, получена практическая сходимость ряда по многомерным угловым кулоновским функциям. Следовательно, в наших расчетах ширины компаунд-резонанса мы ограничиваемся только тремя членами разложения ВФ.

Таблица 1

Численные значения матричных элементов, отвечающие различным амплитудам разложения

Номер амплитуды	M^d	M^{ex}	ΔM^d	ΣM
	а.е.			
$K_v = 1$	0,15077E+00	-0,16753E-01	-0,24007E+00	-0,10605E+00
$K_v = 2$	-0,77347E-01	0,41415E-02	0,10931E+00	0,36112 E-01
$K_v = 3$	0,55632E-03	0,79224E-03	-0,55278E-02	-0,41792 E-02

В табл. 2 представлены численные значения матричных элементов и ширин компаунд-резонанса в зависимости от волнового числа рассеиваемого электрона.

Таблица 2

Численные значения матричных элементов и ширин резонансов для различных волновых чисел рассеиваемого электрона

Волновое число	M^d	M^{ex}	Γ
	а.е.		
$k = 0,8$	0,73124E-01	-0,11734E-01	0,94217E-02
$k = 0,9$	0,63360E-01	-0,10656E-01	0,61726E-02
$k = 1,2$	0,44242E-01	-0,82528E-02	0,21587E-02
$k = 1,3$	0,40769E-01	-0,62459E-02	0,70530E-03

Сравнение рассчитанной ширины резонанса с результатами других теоретических работ (см. [7]), где значение ширины колеблется в интервале 0,15–0,20 эВ, указывает на удовлетворительное согласие результатов данных численных расчетов с опубликованными данными. Уточнение полученных численных значений ширины возможно за счет расширения базиса многомерных угловых функций при расчете ВФ компаунд-состояния. Подобные исследования предполагается провести совместно с расчетами дифференциальных сечений рассеяния. Перспективным также представляется развитие данного метода для описания резонансных явлений при неупругом рассеянии электронов на многоэлектронных ионах.

Список литературы

1. Лендзел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях. Киев: Наукова думка, 1988.
2. Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // *Phys. Rev. A*. 1961. Vol. 124, No. 6. P. 1866–1878.

3. Балашов В. В. Современное состояние в теории резонансов в атомных системах // Лекции 1-й Всесоюз. школы по электронным и атомным столкновениям. Харьков. 1969. С. 1–24.

4. Sung Dahm Oh, Macek J., Ed Kelsey Electron excitation of hydrogenlike ions in the Coulomb Born approximation // *Phys. Rev. A*. 1978. Vol. 17, No. 2. P. 873–879.

5. Садовой А. А. Методы многомерных угловых функций в теоретической и прикладной физике. ВНИИЭФ, г. Арзамас-16, 1994.

6. Thakkar A. J., Smith V. H. Compact and accurate integral-transform wave functions. II. The 2^1S , 2^3S , 2^1P and 2^3P state of the helium-like ions He through Mg^{+10} // *Phys. Rev.* 1977. Vol. 15, No.1. P. 16–22.

7. Варе А., Иванов П. Б., Сенашенко В. С. Энергии возбуждения и ширины $1,3P^{(-)}$ автоионизационных состояний двухэлектронных систем, сходящихся к $n=3$ порогу // Вестник Московского университета. 1982. Т. 23. Сер. 3, № 1. С. 49–54.

Статья поступила в редакцию 31.05.2005

ТЕОРИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ИОННО-ЗВУКОВЫХ ВОЛН В ПЛАЗМЕ С УЧЕТОМ ИНЕРЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

И. Д. Дубинова
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Приведено полное аналитическое решение методом псевдопотенциала задачи о структуре нелинейной ионно-звуковой волны в плазме с учетом инерции электронов. Получено, что уединенная волна может иметь скорость от 1 до 1,58 скоростей линейного ионного звука.

Ионно-звуковые волны в плазме относятся к разряду продольных электростатических волн. История развития их теории длится вот уже несколько десятилетий. В итоге были получены дисперсионные зависимости волн в линейном приближении, изучены решения в виде уединенных волн для эволюционных уравнений типа Кортевега де Вриза в слабо-нелинейном приближении и исследована динамика периодических волн и уединенных волн при учете сильной нелинейности методом псевдопотенциала. В частности, Р. З. Сагдеевым, впервые использовавшим метод псевдопотенциала для простейшей модели ионно-звуковых волн с безынерционными распределенными по Больцману электронами, было численно получено, что скорость уединенной волны v может принимать значения только из диапазона от 1 до 1,58 скорости линейного ионного звука [1–3]. В нашей работе [4] верхний предел 1,58 был выведен в виде точной явной формулы, в которой была использована W -функция Ламберта [5–7].

После работ [1–3] было опубликовано большое количество статей, в которых методом псевдопотенциала развивалась теория сильно-нелинейных ионно-звуковых волн путем учета различных физических факторов: влияния ионной температуры [8–10], наличия двух [11, 12] и более сортов ионов [13], в том числе и отрицательных ионов [14–16], наличия двух групп электронов различных температур [17,18]. Обзор техники применения метода псевдопотенциала Р. З. Сагдеева для нелинейных волн в плазме представлен в [19].

В последнее время появилась серия работ, в которых изучалось влияние различных аспектов движения электронной и ионной компонент на особенности нелинейных ионно-звуковых волн. Так, в работе [20] продемонстрирован газодинамический подход к динамике ионной компоненты при помощи ее описания уравнением типа Бернулли, а в работах [21–23] делалась попытка изучить влияние инерции электронов.

Данная работа продолжает серию работ [21–23] по развитию нелинейной теории ионно-звуковых волн в

плазме с учетом инерции электронов. Здесь нам удалось провести решение задачи аналитически до конца при помощи упомянутой выше W -функции Ламберта.

Начальный этап нашего решения совпадает с [23]. А затем, где авторы [23] делают разложение по малому параметру $1/\mu$ и пренебрегают членами $O(1/\mu^2)$, где $\mu = m_i/m_e$ – отношение ионной и электронной масс, мы пойдем своим точным аналитическим путем. Будем исходить из уравнений для динамики электронной компоненты бесстолкновительной плазмы

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial(n_e u_e)}{\partial x} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} = \mu \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial x} \right) \quad (2)$$

и ионной компоненты

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial(n_i u_i)}{\partial x} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = -\frac{\partial \phi}{\partial x}. \quad (4)$$

Система уравнений дополняется уравнением Пуассона

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = n_e - n_i. \quad (5)$$

Уравнения (1)–(5) записаны для безразмерных величин, нормированных стандартным образом: концентрации электронов и ионов n_e и n_i – на невозмущенные концентрации n_{e0} и n_{i0} , скорости электронов и ионов u_e и u_i – на скорость линейного ионного звука $\sqrt{kT_e/m_i}$, электростатический потенциал ϕ – на величину kT_e/e , длина x – на дебаевскую длину $\lambda_D = \sqrt{kT_e/4\pi n_{e,i0}e^2}$, а время t – на ω_i^{-1} , где обозна-

чено $\omega_i = \sqrt{4\pi n_{e,i} e^2 / m_i}$ – ионная плазменная частота, k – постоянная Больцмана и T_e – электронная температура.

Будем искать решение в виде бегущей со скоростью v стационарной волны, для чего введем новую автомодельную переменную

$$\xi = x - vt, \quad \frac{\partial}{\partial t} = -v \frac{d}{d\xi}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{d}{d\xi}. \quad (6)$$

Тогда система уравнений в частных производных (1)–(5) сведется к следующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

– электронная группа уравнений:

$$-v \frac{dn_e}{d\xi} + \frac{d(n_e u_e)}{d\xi} = 0; \quad (7)$$

$$-v \frac{du_e}{d\xi} + u_e \frac{du_e}{d\xi} = \mu \left(\frac{d\phi}{d\xi} - \frac{1}{n_e} \frac{dn_e}{d\xi} \right); \quad (8)$$

– ионная группа уравнений:

$$-v \frac{dn_i}{d\xi} + \frac{d(n_i u_i)}{d\xi} = 0; \quad (9)$$

$$-v \frac{du_i}{d\xi} + u_i \frac{du_i}{d\xi} = -\frac{d\phi}{d\xi}; \quad (10)$$

– уравнение Пуассона:

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = n_e - n_i. \quad (11)$$

Решение обоих уравнений непрерывности (7) и (9) с учетом $\lim_{u_{e,i} \rightarrow 0} n_{e,i} = 1$ можно легко записать в виде

$$n_{e,i} = \frac{v}{v - u_{e,i}}, \quad (12)$$

а решения уравнений движения – в виде

$$\phi = \ln n_e - \frac{1}{2\mu} (2\nu u_e - u_e^2); \quad (13)$$

$$\phi = \frac{1}{2} (2\nu u_i - u_i^2). \quad (14)$$

Далее в [23] решение анализировалось в указанном выше приближении, а мы продолжим вывод аналитически точного решения.

Из решения уравнений непрерывности (12) следует, что выражения в скобках в соотношениях (13) и (14) можно представить через концентрации

$$2\nu u_{e,i} - u_{e,i}^2 = v^2 \left(1 - \frac{1}{n_{e,i}^2} \right). \quad (15)$$

С учетом этого решения уравнений движения (13) и (14) будут иметь вид

$$\phi = \ln n_e - \frac{v^2}{2\mu} \left(1 - \frac{1}{n_e^2} \right), \quad (16)$$

$$\phi = \frac{v^2}{2} \left(1 - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (17)$$

Разрешим последние соотношения относительно концентраций n_e и n_i . Формально решения обоих уравнений имеют по два действительных корня

$$n_e = \exp \left\{ \phi + \frac{v^2}{2\mu} + \frac{1}{2} W_{0,-1} \left[-\frac{v^2}{\mu} \exp \left(-2\phi - \frac{v^2}{\mu} \right) \right] \right\}; \quad (18)$$

$$n_i = \pm \frac{v}{\sqrt{v^2 - 2\phi}}. \quad (19)$$

В выражении (18) обозначено: $W_0(x)$ – основная (верхняя) ветвь и $W_{-1}(0)$ – отрицательная (нижняя) ветвь W -функции Ламберта, разделяемые точкой сопряжения с координатами $(-1/e, -1)$.

Так как концентрация n_i всегда должна быть положительной, то отрицательное решение в соотношении (19) можно отбросить. Оставшееся положительное решение проходит в нуле через единицу. Это означает, что в точках нулевого потенциала возмущения ионов нет.

Для анализа корней электронного уравнения на рис. 1,а построена зависимость $n_e(\phi)$, имеющая в соответствии с (18) две ветви. Из них только верхняя ветвь проходит в нуле через единицу, что позволяет ей совместно с положительным корнем соотношения (19) удовлетворить правую часть уравнения Пуассона условию квазинейтральности плазмы при $\phi = 0$. На рис. 1,б показана также зависимость $n_i(\phi)$.

Структура полученных решений такова, что электронная концентрация $n_e(\phi)$ определена только при $\phi > \phi_{\min}$, а ионная – $n_i(\phi)$ – только при $\phi < \phi_{\max}$, причем при $\phi = \phi_{\max}$ концентрация $n_i(\phi)$ расходится. Таким образом, плотность пространственного заряда (разность $n_e(\phi) - n_i(\phi)$) определена на полуотрезке $[\phi_{\min}, \phi_{\max})$, концы которого легко определить: ϕ_{\min} – как точку сопряжения ветвей W -функции Ламберта, а ϕ_{\max} – как точку обращения знаменателя в выражении (19) в нуль

$$\phi_{\min} = \frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{\mu} + \ln \frac{v^2}{\mu} + 1 \right); \quad (20)$$

$$\phi_{\max} = \frac{v^2}{2}. \quad (21)$$

График разности $n_e(\phi) - n_i(\phi)$ показан на рис. 1,в. Обратим внимание на то, что этот график немонотонный и имеет две точки смены знака (две точки квазинейтральности).

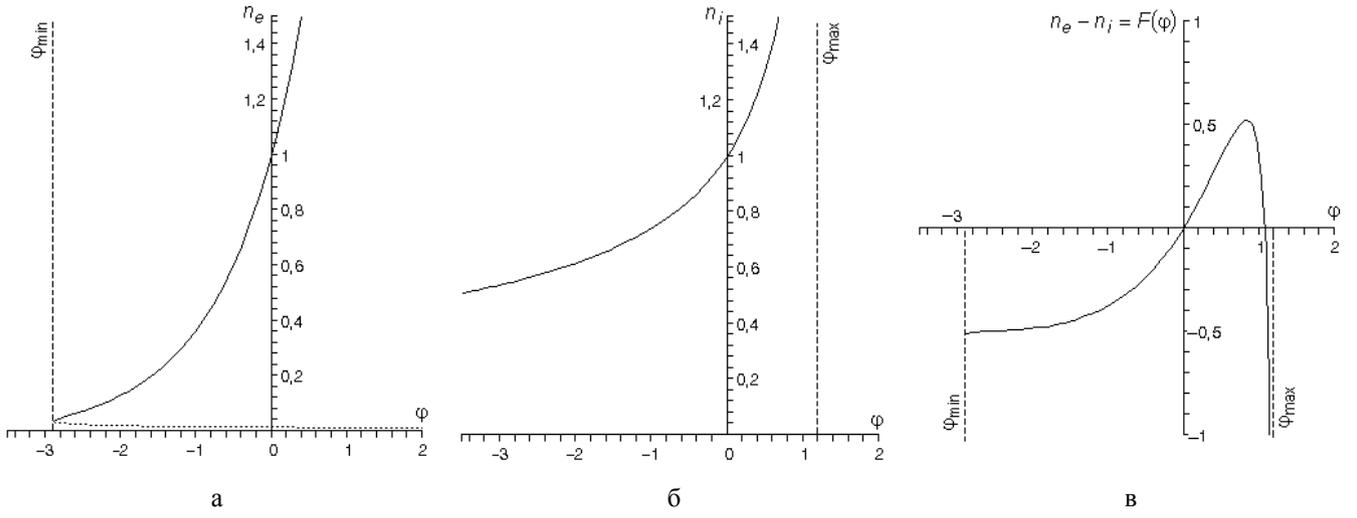


Рис. 1. Зависимости концентраций от электростатического потенциала, построенные при $\nu = 1,56$ и $\mu = 2000$: а – электронная концентрация $n_e(\varphi)$ (сплошная кривая – корень (18), выраженный через верхнюю ветвь $W_0(x)$ функции Ламберта, прерывистая кривая – корень (18), выраженный через нижнюю ветвь $W_{-1}(x)$ функции Ламберта); б – ионная концентрация $n_i(\varphi)$; в – разность концентраций $n_e(\varphi) - n_i(\varphi)$ (псевдосила $F(\varphi)$)

Далее, подставляя выражения (18) и (19) в уравнение Пуассона (11), получим нелинейное дифференциальное уравнение 2-го порядка относительно $\varphi(\xi)$

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = F(\varphi) = \exp\left\{\varphi + \frac{\nu^2}{2\mu} + \frac{1}{2}W_0\left[-\frac{\nu^2}{\mu}\exp\left(-2\varphi - \frac{\nu^2}{\mu}\right)\right]\right\} - \frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 - 2\varphi}}. \quad (22)$$

Решение этого уравнения можно записать в квадратурах

$$\int_{\varphi=\varphi}^{\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\exp\frac{\nu^2}{2\mu} \int_{\psi=\varphi}^{\psi} \exp\left[\psi + \frac{1}{2}W_0\left(-\frac{\nu^2}{\mu}\exp\frac{-\nu^2 - 2\mu\psi}{\mu}\right)\right] d\psi + 2\nu\sqrt{\nu^2 - 2\varphi} + c_1}} d\varphi = \xi + c_2, \quad (23)$$

где c_1 и c_2 – постоянные интегрирования.

Внешний вид решения (23) достаточно громоздок и не нагляден, поэтому для анализа свойств решения уравнения (22) воспользуемся методом псевдопотенциала. Согласно этому методу будем рассматривать (22) как уравнение движения псевдочастицы в потенциальном поле $\Phi(\varphi)$, при этом функция $F(\varphi) = -d\Phi/d\varphi$ играет роль силы, потенциал Φ – роль координаты псевдочастицы, а координата ξ – роль времени.

Уравнение Пуассона (22) после однократного интегрирования принимает вид уравнения сохранения энергии псевдочастицы

$$\left(\frac{d\varphi}{d\xi}\right)^2 + 2\Phi(\varphi) = c_1, \quad (24)$$

где

$$\Phi(\varphi) = -\nu\sqrt{\nu^2 - 2\varphi} - \int_{\phi=\varphi}^{\varphi} \exp\left[\phi + \frac{\nu^2}{2\mu} + \frac{1}{2}W_0\left(-\frac{\nu^2}{\mu}\exp\frac{-\nu^2 - 2\mu\phi}{\mu}\right)\right] d\phi \quad (25)$$

и постоянную c_1 можно выбрать так, чтобы $\Phi(\varphi_{\min}) = 0$.

На рис. 2 показаны графики $\Phi(\varphi)$ при различных значениях скорости v . Видно, что псевдопотенциал имеет две точки равновесия псевдочастицы: минимум – при $\varphi > 0$ и максимум – при $\varphi = 0$, соответствующие нулям псевдосилы $F(\varphi)$. Это означает, что возможно периодическое движение псевдочастицы-осциллятора в потенциальной яме псевдопотенциала, которое соответствует периодической ионно-звуковой волне, и движение по сепаратрисе через точку максимума, которое соответствует уединенной ионно-звуковой волне, если правый конец псевдопотенциала находится выше локального максимума ($\Phi(0) < \Phi(\varphi_{\max})$) (рис. 2,а).

В противном случае, когда правый конец ниже максимума ($\Phi(0) > \Phi(\varphi_{\max})$) (рис. 2,в), уединенная волна опрокидывается. И то значение v , при котором высота правого конца в точности равна высоте максимума ($\Phi(0) = \Phi(\varphi_{\max})$) (рис. 2,б), является предельно возможной скоростью уединенной волны. График рис. 2,б построен при $v = 1,58$ – это и есть приближенное значение верхнего предела, совпадающее, как оказалось, со значением, полученным в модели безынерционных электронов [1–4].

Перейдем к рассмотрению структуры волны. На рис. 3 построены вычисленные по формуле (23) следующие профили в волне: электростатического потенциала $\varphi(\xi)$, электронной и ионной концентраций $n_e(\xi)$ и $n_i(\xi)$, а также разности $n_i(\xi) - n_e(\xi)$,

пропорциональной плотности пространственного заряда, при условиях, которые обеспечивают движение псевдочастицы-осциллятора вдали от сепаратрисы в глубине потенциальной ямы. Заметна асимметрия этих колебаний, когда амплитуда колебаний “вверх” не равна амплитуде колебаний “вниз”. Изменение знака заряда на рис. 3,г соответствует отмеченному выше изменению знака псевдосилы $F(\varphi)$. Физически это означает следующее. Можно упрощенно представить, что всплеск ионной плотности представляет собой контейнер, содержащий легкие, но обладающие конечной массой электроны. При движении контейнера находящиеся в ней электроны двигаются еще быстрее и ударяются об ее стенки подобно тому, как это происходит в детской погремушке. Конечная масса электронов (инерция) здесь ответственна за появление участков отрицательного пространственного заряда перед и за основным всплеском, которые заметны на рис. 3,г.

На рис. 4 построены аналогичные профили при движении псевдочастицы вблизи сепаратрисы по краю потенциальной ямы, когда каждый всплеск близок по форме уединенной волне.

Таким образом, в данной работе приведено полное аналитическое решение задачи о структуре нелинейной ионно-звуковой волны в плазме с учетом инерции электронов. Получено, что уединенная волна может иметь скорость от 1 до 1,58 скоростей линейного ионного звука.

Автор благодарна В. Б. Якубову, чьи советы позволили улучшить данную статью.

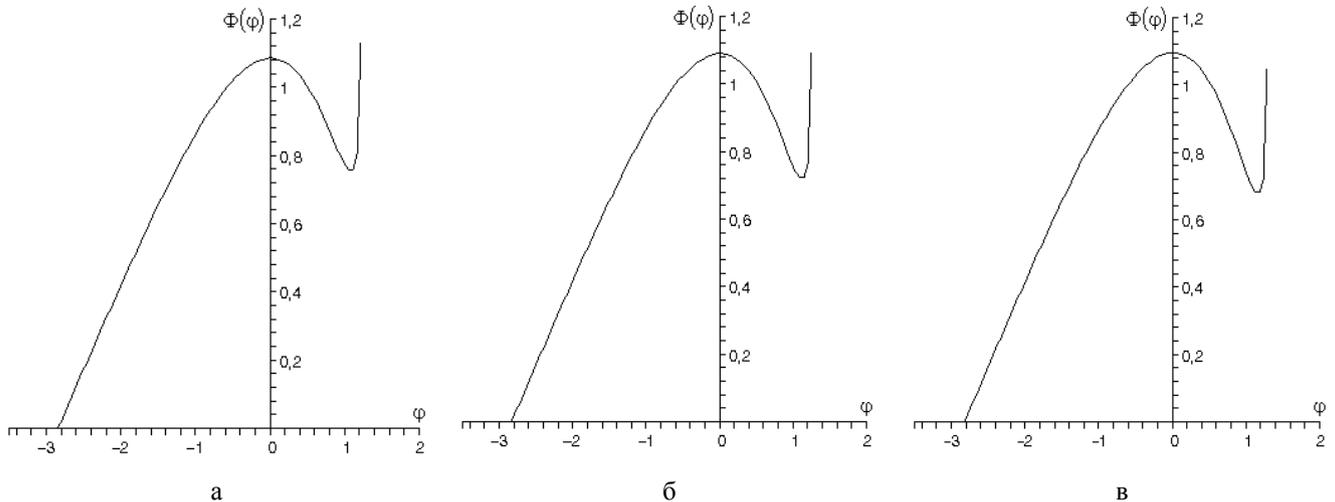


Рис. 2. Зависимости $\Phi(\varphi)$ псевдопотенциала от электростатического потенциала, вычисленные при $\mu = 2000$ и различных значениях v : а – $v = 1,56$; б – $v = 1,58$; в – $v = 1,60$

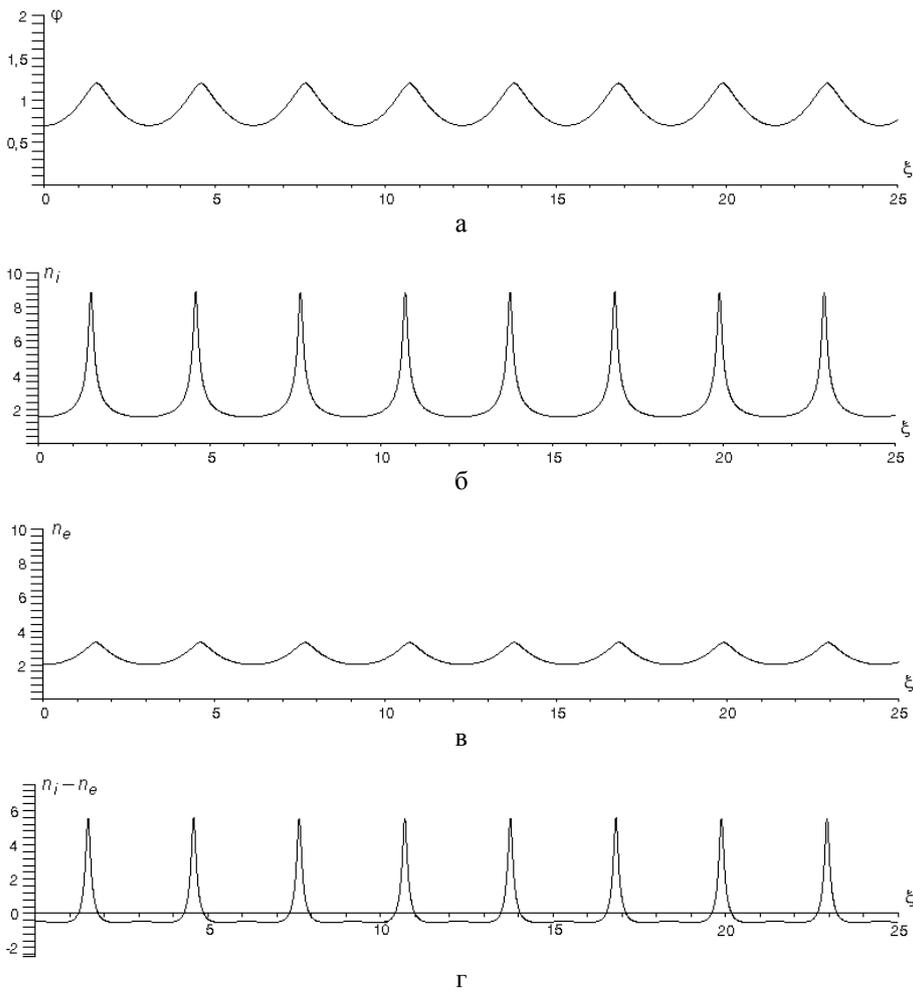


Рис. 3. Профили в волне, вычисленные вдали от сепаратрисы (при начальных условиях $\varphi(0) = 0,7$, $\varphi'(0) = 0$ и при $\nu = 1,56$, $\mu = 2000$: а – электростатического потенциала $\varphi(\xi)$; б – электронной концентрации $n_e(\xi)$; в – ионной концентрации $n_i(\xi)$; г – разности концентраций $n_i(\xi) - n_e(\xi)$)

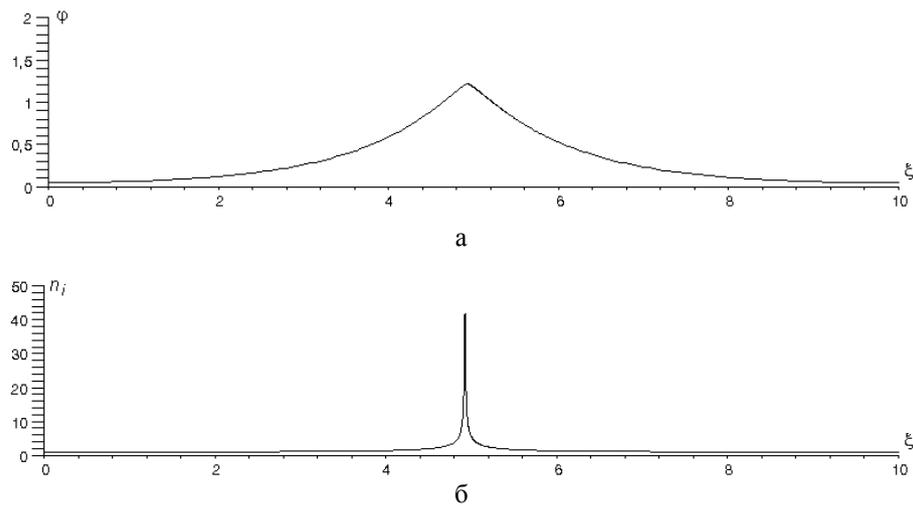


Рис. 4. Профили в волне, вычисленные вдали от сепаратрисы (при начальных условиях $\varphi(0) = 0,05$, $\varphi'(0) = 0$ и при $\nu = 1,56$, $\mu = 2000$: а – электростатического потенциала $\varphi(\xi)$; б – электронной концентрации $n_e(\xi)$; в – ионной концентрации $n_i(\xi)$; г – разности концентраций $n_i(\xi) - n_e(\xi)$) (окончание рисунка на с. 23)

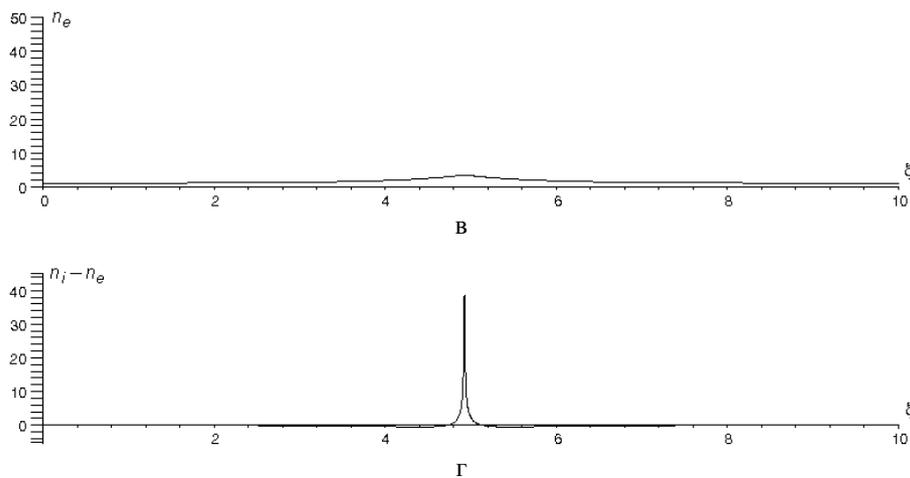


Рис. 4. Окончание

Список литературы

1. Веденов А. А., Велихов Е. П., Сагдеев Р. З. Нелинейные колебания разреженной плазмы // Ядерный синтез. 1961. Т. 1. С. 82–100.

2. Сагдеев Р. З. Коллективные процессы и ударные волны в разреженной плазме // Вопросы теории плазмы. М.: Атомиздат, 1964. Вып. 4. С. 20–187.

3. Sagdeev R. Z. The 1976 Oppenheimer lectures: critical problems in plasma astrophysics // Rev. Mod. Phys. 1979. Vol. 51, No. 1. P. 1–20.

4. Dubinov A. E., Dubinova I. D. How can one solve exactly some problems in plasma theory // J. Plasma Phys. 2005. Vol. 71, No. 5. P. 715–728.

5. Valluri S. R., Jeffrey D. J., Corless R. M. Some Applications of the Lambert W -Function to Physics // Canadian J. Phys. 2000. Vol. 78. P. 823–831.

6. Дубинов А. Е., Дубинова И. Д., Сайков С. К. W -функция Ламберта: таблица интегралов и другие математические свойства. Саров: СарФТИ, 2004.

7. Дубинова И. Д. Применение W -функции Ламберта в математических задачах физики плазмы // Физика плазмы. 2004. Т. 30, № 10. С. 937–943.

8. Sakanaka P. H. Formation and interaction of ion-acoustic solitary waves in a collisionless warm plasma // Phys. Fluids. 1972. Vol. 15, No. 2. P. 304–310.

9. Baumgärtel K. Finite ion temperature effects on strongly non-linear ion acoustic solitons // Beiträge aus der Plasma Physik. 1978. Vol. 4, No. 18. P. 225–229.

10. Mamun A. A. Effects of ion temperature on electrostatic solitary structures in nonthermal plasmas // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 55, No. 2. P. 1852–1857.

11. White R. B., Fried B. D., Coroniti F. V. Structure of ion acoustic solitons and shock waves in a two-component plasma // Phys. Fluids. 1972. Vol. 15, No. 8. P. 1484–1490.

12. Tran M. Q., Bitter M., Hirt P. J. Collisionless ion acoustic shocks in a two component plasma // Plasma Phys. 1974. Vol. 16. P. 1198–1200.

13. Sakanaka P. H., Shukla P. K. Large amplitude solitons and double layers in multicomponent dusty plasmas // Phys. Scripta. 2000. Vol. T84. P. 181–183.

14. Dey M., Goswami K. S., Bujarbarua S. Theory of weak modified electron acoustic double layers and solitary waves in presence of negative ions // Contrib. Plasma Phys. 1989. Vol. 29, No. 6. P. 599–608.

15. Gill T. S., Kaur H., Saini N. S. Ion-acoustic solitons in a plasma consisting of positive and negative ions with nonisothermal electrons // Phys. Plasma. 2003. Vol. 10, No. 10. P. 3927–3932.

16. Bhattacharya S. K., Paul S. N., Chakraborty B. Effects of non-thermal electrons and negative ions on ion-acoustic solitary waves in a bounded plasma // Indian J. Phys. 2003. Vol. 77B, No. 3. P. 327–334.

17. Ghosh S. S., Iyengar A. N. S. Anomalous width variations for ion acoustic rarefactive solitary waves in a warm ion plasma with two electron temperatures // Phys. Plasma. 1997. Vol. 4, No. 9. P. 3204–3210.

18. Ghosh S. S., Iyengar A. N. S. Fully nonlinear compressive ion acoustic solitary waves in a two electron temperature plasma with warm ions // Phys. Scripta. 2000. Vol. 61. P. 361–364.

19. Заславский Г. М. Нелинейные волны и их взаимодействие // УФН. 1973. Т. 111, № 3. С. 395–426.

20. McKenzie J. F. The ion-acoustic soliton: a gas-dynamic viewpoint // Phys. Plasma. 2002. Vol. 9, No. 3. P. 800–805.

21. Mondal K. K., Paul S. N., Chowdhury A. R. Effects of boundary and electron inertia on the ion acoustic wave in a plasma: a pseudopotential approach // Austral. J. Phys. 1997. Vol. 51, No. 113–124.

22. Paul S. N., Chattopadhyaya S., Bhattacharya S. K., Bera B. On the study of ion-acoustic solitary waves and double-layers in a drift multicomponent plasma with electron inertia // Pramana – J. Phys. 2003. Vol. 60, No. 6. P. 1217–1233.

23. Chatterjee P., Das B. Effect of electron inertia on the speed and shape of ion-acoustic solitary waves in plasma // Phys. Plasma. 2004. Vol. 11, No. 7. P. 3616–3620.

Статья поступила в редакцию 02.11.2005

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛОВ РОСА-М. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ

Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко¹, М. В. Жерноклетов, В. Г. Куделькин, М. А. Мочалов
РФЯЦ-ВНИИЭФ

В рамках феноменологической термодинамики получена модель, которая позволяет разрабатывать УРС, описывающие термодинамические свойства металлов в экспериментально исследованной области. Благодаря предельным переходам, следующим из расчетов по теоретическим УРС, она обладает хорошими аппроксимационными свойствами, что позволяет проводить расчет термодинамических свойств и в окрестности экспериментально исследованной области. Модель предусматривает нормировку на состояние металла при нормальных условиях. Возможности модели, область ее применимости продемонстрированы на примере разработки УРС Al. Представлены результаты сравнения расчетов различных изолиний по УРС с экспериментальными данными и расчетами по другим моделям. В работе представлены новые экспериментальные данные о положении изэнтропы алюминия при разгрузке из состояния $P = 229,71$ ГПа на ударной адиабате в аэрогель (SiO_2) плотностью $0,08$ г/см³.

Модель уравнения состояния

В используемой в данной работе модели в соотношениях для расчета давления и удельной внутренней энергии выделено три составляющих.

$$P(\delta, T) = P_x(\delta) + P_p(\delta, T) + P_e(\delta, T); \quad (1)$$

$$E(\delta, T) = E_x(\delta) + E_p(\delta, T) + E_e(\delta, T), \quad (2)$$

где $\delta = \rho/\rho_0$ – относительное сжатие; ρ – текущая плотность вещества; ρ_0 – плотность при нормальных условиях; P_x, E_x – потенциальные (“холодные”) составляющие давления и удельной энергии; P_p, E_p – тепловые (“решеточные”) составляющие давления и удельной энергии, связанные с тепловым движением ионов (ядер); P_e, E_e – тепловые составляющие, учитывающие движение свободных термически возбужденных электронов.

В зависимостях, используемых в данной модели для представления потенциальных составляющих, выделено три участка: $0 \leq \delta \leq 1$, $1 \leq \delta \leq \delta_c$, $\delta > \delta_c$. δ_c – точка начала сшивки зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ с использованием экспериментальной ударной адиабаты и параметров тепловых составляющих, принятых для уравнения состояния конкретного вещества, с зависимостью $P_x(\delta)$, рассчитанной в области сверхвысоких давлений и плотностей по теоретической модели УРС.

При $\delta = 1$ давление в веществе нормируется на нормальные условия $\rho = \rho_0$, $P_0 = 10^{-4}$ ГПа, $T = 293$ К. Таким образом, значение потенциального давления в точке $\delta = 1$ определяется разностью: $P_0 - P_T$ ($\delta = 1$, $T = 293$ К), где $P_T = P_p + P_e$. Обозначим его как P_{x0} . Значения $P_x = 0$ и $E_x = 0$ будут достигаться в точке $\rho = \rho_{0k}$ (ρ_{0k} – кристаллическая плотность вещества при $T = 0$). $E_x(\delta = 1) = E_{x0}$.

Для представления потенциального давления в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$ используется зависимость вида

$$P_x(\delta) = a\delta^{n+1} + b\delta^{m+1} + c\delta^{l+1}. \quad (3)$$

Потребуем, чтобы для зависимостей P_x и E_x в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$ выполнялись следующие условия:

$$P_x|_{\delta=1} = P_{x0}; \quad P_x|_{\delta=0} = 0; \quad P_x|_{\delta < 1} < 0; \quad E_x|_{\delta=1} = E_{x0};$$

$$E_x|_{\delta=0} = Q_{св}; \quad \left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=1} = P'_{x0}; \quad \left. \frac{d^2P_x}{d\delta^2} \right|_{\delta=1} = P''_{x0}.$$

Последние два условия означают сшивку потенциального давления до второй производной с расчетами по формулам, предназначенным для описания потенциальных составляющих на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$. P'_{x0}, P''_{x0} – соответственно первая и вторая производная, вычисленные по этим формулам в точке $\delta = 1$. $Q_{св}$ – энергия связи вещества.

¹ gud@vniief.ru

Из соотношения (3) и условия термодинамической согласованности следует выражение для расчета потенциальной энергии в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$

$$E_x(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \left[a \frac{\delta^n}{n} + b \frac{\delta^m}{m} + c \frac{\delta^l}{l} \right] + Q_{св}, \quad (4)$$

где энергия сублимации (связи) $Q_{св}$ связана с другими параметрами зависимости $E_x(\delta)$ следующим соотношением:

$$Q_{св} = E_{x0} - \frac{1}{\rho_0} \left[\frac{a}{n} + \frac{b}{m} + \frac{c}{l} \right],$$

полученным из условия $E_x(\delta = 1) = E_{x0}$.

Учитывая приведенные выше условия, получим формулы для расчета некоторых свободных параметров выражений (3) и (4)

$$n = \frac{P'_{x0} - P'_{x0}(m+l+1) + P_{x0}(l+1)(m+1)}{P'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})ml - P_{x0}(m+l+1)},$$

$$a = \frac{n}{(n-l)(n-m)} [P'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})ml - P_{x0}(m+l+1)];$$

$$b = \frac{m}{(m-l)(m-n)} [P'_{x0} - \rho_0(Q_{св} - E_{x0})nl - P_{x0}(n+l+1)];$$

$$c = P_{x0} - a - b.$$

Параметры m и l выбираются из условия наилучшего описания критической точки двухфазной области жидкость – пар и данных, полученных в ударно-волновых экспериментах при исследовании изэнтроп расширения и ударных адиабат сильно пористых образцов.

В настоящее время обязательным условием построения уравнения состояния для конкретного вещества является наличие для него основной ударной адиабаты (ударной адиабаты образцов вещества с нормальной начальной плотностью). Обычно она представляет собой полученную в результате расчетов или аппроксимации экспериментальных данных определенного вида аналитическую зависимость, связывающую скорость фронта ударной волны с массовой скоростью за фронтом, $-D(U)$ зависимость. Из этой зависимости с использованием законов сохранения устанавливается связь между давлением и плотностью за фронтом ударной волны. В рассматриваемой нами модели УРС (1), (2), как и практически во всех полуэмпирических моделях, давление можно представить как сумму потенциального и теплового. Если заданы параметры тепловых составляющих УРС, то потенциальные составляющие в области, где известна ударная адиабата, могут быть определены в табличном виде, как результат решения дифференциального уравнения.

Вспользуемся:

уравнением Гюгонио

$$E_\Gamma - E_0 = (P_\Gamma + P_0) \frac{k\delta - 1}{2\rho_0\delta}; \quad (5)$$

законом сохранения импульса

$$P_\Gamma = P_0 + \rho_0 DU \frac{1}{k}; \quad (6)$$

законом сохранения массы

$$\delta = \frac{D}{(D-U)k}, \quad (7)$$

где $k = \rho_0/\rho_{00}$ – коэффициент пористости вещества; D – скорость фронта ударной волны; U – массовая скорость за фронтом; P_Γ, E_Γ – давление и энергия на фронте ударной волны.

Уравнения (5)–(7) дополняются ударной адиабатой вещества в виде $D(U)$ зависимости. Уравнения (1), (2) и (5)–(7) позволяют составить дифференциальное уравнение для определения температуры T за фронтом ударной волны. Перепишем (1), (2) в виде

$$P(\delta, T) = P_x(\delta) + P_T(\delta, T) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta) + P_T(\delta, T);$$

$$E(\delta, T) = E_x(\delta) + E_T(\delta, T),$$

где $P_T(\delta, T), E_T(\delta, T)$ – тепловые составляющие уравнения состояния. Здесь мы использовали известное уравнение, связывающее потенциальное давление с потенциальной энергией и являющееся следствием термодинамического тождества

$$P_x(\delta) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta).$$

Учитывая, что на ударной адиабате $P(\delta, T) = P_\Gamma(\delta), E(\delta, T) = E_\Gamma(\delta)$, получаем два уравнения

$$P_\Gamma(\delta) = \rho_0 \delta^2 E'_x(\delta) + P_T(\delta, T); \quad (8)$$

$$E_\Gamma(\delta) = E_x(\delta) + E_T(\delta, T). \quad (9)$$

Продифференцируем (9) по δ , причем производную от $E_T(\delta, T)$ будем брать вдоль ударной адиабаты

$$E'_x(\delta) + \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T + \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = E'_\Gamma(\delta).$$

Тогда с учетом формулы (8) можно записать

$$E'_\Gamma(\delta) - \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T - \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = \frac{P_\Gamma(\delta) - P_T(\delta, T)}{\rho_0 \delta^2}.$$

Таким образом, получено обыкновенное дифференциальное уравнение относительно температуры $T(\delta)$ на ударной адиабате

$$\left(\frac{dT}{d\delta} \right)_\Gamma = \frac{E'_\Gamma(\delta) - \left(\frac{\partial E_T}{\partial \delta} \right)_T - \frac{P_\Gamma(\delta) - P_T(\delta, T)}{\rho_0 \delta^2}}{\left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_\delta} (T(\delta = 1) = 293 \text{ K}). \quad (10)$$

В результате решения (10) находится таблица значений температуры от плотности вдоль ударной адиабаты – $T_i(\delta_i)$. В точках, где известна температура, потенциальные составляющие вычисляются по формулам

$$P_{x_i}(\delta_i) = P_\Gamma(\delta_i) - P_T(\delta_i, T_i)$$

$$\text{и } E_{x_i}(\delta_i) = E_\Gamma(\delta_i) - E_T(\delta_i, T_i). \quad (11)$$

Уравнение (10) может использоваться для любой модели уравнения состояния, позволяющей выполнять расчеты термодинамических функций по входным переменным плотность – температура. Расчеты проводятся до значения δ_c , находящегося в диапазоне, где определена ударная адиабата.

Обычно непосредственно в расчетах используются не таблицы $P_{x_i}(\delta_i)$ и $E_{x_i}(\delta_i)$, а результаты их аппроксимации с использованием различных функций, поэтому расчет по формулам (10), (11) таблицы значений $P_x(\delta)$ проводится только на этапе подбора параметров УРС. В данной работе для аппроксимации используются интерполяционные кубические сплайны класса C^2 [1]. На участках $[\delta_i, \delta_{i+1}]$ сплайн имеет вид

$$P_x(\delta) = P_{x_i} + h_i t [m_i + t(B_i + tA_i)], \quad (12)$$

где $A_i = -2 \frac{P_{x_{i+1}} - P_{x_i}}{h_i} + (m_{i+1} + m_i)$; $B_i = -A_i + \frac{P_{x_{i+1}} - P_{x_i}}{h_i} - m_i$; $t = \frac{\delta - \delta_i}{h_i}$; $h_i = \delta_{i+1} - \delta_i$; P_{x_i} – значение функции в точке δ_i ; $m_i \equiv \left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_i}$ – коэффициенты, определяемые из условий непрерывности вторых производных в узлах. Для определения m_i необходимо задать значения первых производных $P_x(\delta)$ в точках $\delta = 1$, $\delta = \delta_c$, являющихся границами участка, аппроксимируемого сплайнами. Они вычисляются по заданной $D(U)$ зависимости. В точке $\delta = 1$ имеет место касание второго порядка ударной адиабаты с нормальной изэнтропой, и можно записать

$$\left. \frac{dP_T}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \left(\frac{\partial P}{\partial \delta} \right)_S \Big|_{T=293, \delta=1},$$

где $\left. \frac{dP_T}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2$, $D_0 = D(U=0)$.

Тогда наклон холодной кривой в точке $\delta = 1$ вычисляется по формулам

$$\left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=1} = \rho_0 D_0^2 - \left(\frac{\partial P_T}{\partial \delta} \right)_S \Big|_{T=293, \delta=1}.$$

В приведенных выражениях D_0 имеет смысл изэнтропической скорости звука C_0 в точке $\rho = \rho_0$, ($\delta = 1$).

В точке $\delta = \delta_c$ значение наклона холодной кривой определяется при решении дифференциального уравнения (10) по формуле

$$\left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_c} = P'_T(\delta_c) - \left(\frac{\partial P_T}{\partial \delta} \right)_T - \left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_\delta \left(\frac{dT}{d\delta} \right)_T;$$

C_0 и $P'_c = \left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=\delta_c}$ являются задаваемыми параметрами УРС.

Потенциальная энергия на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$ записывается в виде

$$E_x(\delta) = E_{x_0} + \frac{1}{\rho_0} \left[\Phi(\delta_i, \delta) + \sum_{j=1}^i \Phi(\delta_{j-1}, \delta_j) \right], \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(\delta_i, \delta) &= \frac{A_i t^2}{2} + (B_i - 2A_i \tau_i) t + \\ &+ [m_i + \tau_i (3A_i \tau_i - 2B_i)] \ln \frac{\delta}{\delta_i} + \\ &+ \left[\delta_i (m_i + \tau_i (A_i \tau_i - B_i)) - P_{x_i} \right] \left[\frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta_i} \right], \\ \delta_i < \delta \leq \delta_{i+1}, \quad \tau_i &= \frac{\delta_i}{h_i}. \end{aligned}$$

При $\delta > \delta_c$ потенциальные составляющие давления и энергии рассчитываются по алгоритму, обеспечивающему переход от зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной по уравнению (12), к зависимости, рассчитанной по модели ТФП [2]. Для обеспечения непрерывности функции и ее производной в точке $\delta = \delta_c$, используется алгоритм, аналогичный применяемому в программе PANDA [3]. По данному алгоритму при $\delta \geq \delta_c$ для расчета потенциальной составляющей энергии используется следующая формула:

$$E_x(\delta) = (E_{\text{ТФП}}(\delta) - E_{\text{ТФП}}(\delta_c)) Y(\delta) + \Delta E_x, \quad (14)$$

откуда с помощью основного термодинамического тождества получается формула для вычисления давления

$$P_x(\delta) = P_{\text{ТФП}}(\delta) Y(\delta) + \delta^2 \rho_0 (E_{\text{ТФП}}(\delta) - E_{\text{ТФП}}(\delta_c)) \frac{dY}{d\delta}. \quad (15)$$

В формулах (14), (15) $P_{\text{ТФП}}(\delta)$, $E_{\text{ТФП}}(\delta)$ – давление и энергия, рассчитываемые по модели ТФП [2], $Y(\delta) = 1 + (b_1 + b_2 \delta^{-\alpha} + b_3 \delta^{-2\alpha}) \delta^{-1}$ – интерполяционная функция. Константы ΔE_x , b_1 , b_2 и b_3 выбираются из условий непрерывности функций и их производных в точке δ_c

$$\begin{aligned} E_x(\delta_c) &= E_S(\delta_c); \quad P_x(\delta_c) = P_S(\delta_c); \quad P'_x(\delta_c) = P'_S(\delta_c); \\ P''_x(\delta_c) &= P''_S(\delta_c), \end{aligned}$$

где индексом “s” обозначены значения давления и энергии, рассчитываемые по формулам (12) и (13), штрихом – производные давления по сжатию. Очевидно, что $\Delta E_x = E_S(\delta_c)$. Параметр α определяет скорость приближения значения потенциального давления, рассчитанного по данной модели, к значениям, рассчитанным по модели ТФП [2].

Для описания вклада атомов решетки в тепловую часть энергии, взято выражение, используемое в модели УРС [4], помноженное на функцию Дебая

$$E_p(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_p(\delta) + T \frac{C_{V0}T}{2}}{\psi_p(\delta) + T}, \quad (16)$$

где $D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z t^3 dt / (e^t - 1)$ – функция Дебая; $z = \frac{\theta(\delta, T)}{T}$;

$\theta(\delta, T)$ – температура Дебая; C_{V0} – теплоемкость решетки при нормальных условиях; $\psi_p(\delta)$ – функция, характеризующая высоту потенциального барьера, который нужно преодолеть атому, чтобы уйти из узла решетки, и зависящая только от плотности (расстояния между атомами).

Примем свободную энергию в виде, соответствующем свободной энергии в форме Дебая без учета членов, не зависящих от температуры

$$F_p(\delta, T) = C_{V0}T \left(\ln(1 - e^{-z}) - \frac{1}{3}D(z) \right), \quad (17)$$

Для нахождения вида функции $\theta(\delta, T)$ воспользуемся уравнением связи между внутренней и свободной энергией

$$F(\delta, T) = E(\delta, T) + T \left(\frac{\partial F(\delta, T)}{\partial T} \right)_\delta.$$

Решение этого дифференциального уравнения дает следующий вид $\theta(\delta, T)$:

$$\theta(\delta, T) = \theta_D(\delta) \sqrt{1 + T/\psi_p(\delta)}, \quad \theta_D(\delta) = \theta(\delta, 0),$$

при произвольном виде $\psi_p(\delta)$.

Связь $\theta_D(\delta)$ с функцией $\Gamma_{p0}(\delta)$, характеризующей зависимость коэффициента Грюнайзена ядер (решетки) “холодного” вещества от плотности (при $T \cong 0$), определяется следующим образом:

$$\theta_D(\delta) = \theta_0 \exp \left(\int_1^\delta \frac{\Gamma_{p0}(x)}{x} dx \right), \quad \theta_0 = \theta_D(1).$$

Дифференцированием (17) по плотности получим выражение для давления

$$P_p(\delta, T) = D(z) \frac{2\psi_p(\delta)\Gamma_{p0}(\delta) + T\gamma_\phi}{\psi_p(\delta) + T} \rho_0 \delta T \frac{C_{V0}}{2} \quad (18)$$

при условии, что функции $\psi_p(\delta)$ и $\Gamma_{p0}(\delta)$ связаны дифференциальным уравнением, решение которого имеет общий вид

$$\psi_p(\delta) = \psi_{p0} \delta^{-\gamma_\phi} \exp \left(2 \int_1^\delta \Gamma_{p0}(\tau) \frac{d\tau}{\tau} \right) \quad (\psi_{p0} = \psi_p(1)), \quad (19)$$

γ_ϕ – асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена решетки при $T \rightarrow \infty$.

Из (16) и (18) следуют выражения для коэффициента Грюнайзена и теплоемкости ионов

$$\Gamma_p(\delta, T) = \frac{2\psi_p(\delta)\Gamma_{p0}(\delta) + T\gamma_\phi}{2\psi_p(\delta) + T}, \quad (20)$$

$$C_V(\delta, T) = D(z) \left(\frac{\psi_p^2(\delta)}{(\psi_p(\delta) + T)^2} + 1 \right) \frac{C_{V0}}{2} + D'_z(z) \frac{2\psi_p(\delta) + T}{\psi_p(\delta) + T} \frac{C_{V0}T}{2} \frac{\partial z}{\partial T}, \quad (21)$$

где $D'_z(z)$ – производная от функции Дебая по аргументу, а производная аргумента по температуре

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{z}{2T} \left[1 + \frac{\psi_p(\delta)}{\psi_p(\delta) + T} \right].$$

Из выражений (20), (21) следуют предельные переходы

$$\left. \begin{aligned} C_V(\delta, T) &\rightarrow 0; \quad \Gamma_p(\delta, T) \rightarrow \Gamma_{p0}(\delta); \\ P_p(\delta, T) &\rightarrow 0; \quad E_p(\delta, T) \rightarrow 0 \end{aligned} \right\} \text{при } T \rightarrow 0 -$$

твердое тело;

$$\left. \begin{aligned} C_V(\delta, T) &\rightarrow \frac{C_{V0}}{2}; \quad \Gamma_p(\delta, T) \rightarrow \gamma_\phi; \\ P_p(\delta, T) &\rightarrow \rho_0 \delta \frac{C_{V0}T}{2} \gamma_\phi; \quad E_p(\delta, T) \rightarrow \frac{C_{V0}T}{2} \end{aligned} \right\}$$

при $\frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow \infty$ – идеальный газ.

Для функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ выбрана единая функциональная зависимость вида

$$\Gamma_{p0}(\delta) = A_p + \frac{(\gamma_{1p} - A_p)}{1 + (\delta/\delta_{mp})^{a_p}} + \frac{(\gamma_{2p} - A_p)}{1 + (\delta/\delta_{np})^{-b_p}}. \quad (22)$$

Данный вид зависимости имеет следующие предельные переходы:

$$\text{при } \delta \rightarrow 0 \quad \Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{1p};$$

$$\text{при } \delta \rightarrow \infty \quad \Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{2p}.$$

Выполнение условия $\Gamma_{p0}(\delta=1) = \gamma_{0p}$, где γ_{0p} – значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях обеспечивается за счет коэффициента A_p (см. формулу (22)), который связан с другими параметрами зависимости (22) следующим соотношением:

$$A_p = \frac{\gamma_{0p} - \frac{\gamma_{1p}}{1 + (\delta_{mp})^{-a_p}} - \frac{\gamma_{2p}}{1 + (\delta_{np})^{b_p}}}{1 - \frac{1}{1 + (\delta_{mp})^{-a_p}} - \frac{1}{1 + (\delta_{np})^{b_p}}}.$$

Параметры a_p , b_p , δ_{mp} , δ_{np} отвечают за скорость выхода функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотические значения.

Из формул (19) и (22) получим выражение для расчета $\psi_P(\delta)$

$$\psi_P(\delta) = \psi_{P0} \delta^{2(\gamma_{1P} + \gamma_{2P} - A_p) - \gamma_\Phi} \times \exp \left[2 \left[-\frac{(\gamma_{1P} - A_p)}{a_p} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{mp})^{a_p}}{1 + (\delta_{mp})^{-a_p}} \right) + \frac{(\gamma_{2P} - A_p)}{b_p} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{np})^{-b_p}}{1 + (\delta_{np})^{b_p}} \right) \right] \right].$$

Выражение для расчета энтропии получается при дифференцировании свободной энергии (17) по температуре при постоянном удельном сжатии

$$S_P(\delta, T) = - \left(\frac{\partial F_P(\delta, T)}{\partial T} \right)_\delta = C_{V0} \left(\frac{1}{2} D(z) \left(\frac{\psi_P(\delta, T)}{\psi_P(\delta, T) + T} + \frac{5}{3} \right) - \ln(1 - e^{-z}) \right). \quad (23)$$

С использованием закона плавления Линдемана, выраженного через коэффициент Грюнайзена решетки [5], получена относительно простая зависимость для расчета температуры на линии плавления через параметры данной модели УРС

$$T_m(\delta) = T_{m0} \left(\frac{\delta}{\delta_{m0}} \right)^{\gamma_\Phi} \frac{\psi(\delta)}{\psi(\delta_{m0})}, \quad (24)$$

где T_{m0} , δ_{m0} – температура и относительное сжатие вещества в точке плавления при $P = 1$ атм.

Электронный вклад в тепловую часть давления и энергии определяется следующими формулами:

$$P_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_\Phi \rho_0 \delta \times \left(\left(\frac{\partial f_e}{\partial \delta} \right)_T \delta \ln \delta + f_e(\delta, T) \right) \frac{T^2}{T_\Phi \delta^{f_e(\delta, T)} + T}, \quad (25)$$

$$E_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_\Phi \left(1 - T \left(\frac{\partial f_e}{\partial T} \right)_\delta \ln \delta \right) \frac{T^2}{T_\Phi \delta^{f_e(\delta, T)} + T}. \quad (26)$$

В выражениях (25), (26), в отличие от модели УРС РОСА [4], функция f_e зависит не только от плотности, но и от температуры

$$f_e(\delta, T) = \frac{f_{e0}(\delta) \psi_e(\delta) + T \gamma_{eT}}{\psi_e(\delta) + T}, \quad (27)$$

где $\psi_e(\delta) = T_g \delta^{k_e}$ – функция, которая определяет скорость перехода коэффициента Грюнайзена электронов $\Gamma_e(\delta, T)$ к предельному значению γ_{eT} при $T \rightarrow \infty$.

Из соотношений (25), (26) следует, что формула для коэффициента Грюнайзена электронов будет иметь вид

$$\Gamma_e(\delta, T) = \frac{\left(\frac{\partial f_e(\delta, T)}{\partial \delta} \right)_T \delta \ln \delta + f_e(\delta, T)}{1 - T \left(\frac{\partial f_e(\delta, T)}{\partial T} \right)_\delta \ln \delta}. \quad (28)$$

Тогда получим следующие предельные переходы:

$$\left. \begin{aligned} f_e(\delta, T) &\rightarrow f_{e0}(\delta); \\ \Gamma_e(\delta, T) &\rightarrow \frac{df_{e0}}{d\delta} \delta \ln \delta + f_{e0}(\delta); \\ F_e(\delta, T) &\rightarrow -\frac{1}{2} \beta_0 T^2 \delta^{-f_{e0}(\delta)}; \\ C_{Ve} &\rightarrow \beta_0 T \delta^{-f_{e0}(\delta)} \end{aligned} \right\} \text{при } T \rightarrow 0;$$

$$\left. \begin{aligned} f_e(\delta, T) &\rightarrow \gamma_{eT}; \quad \Gamma_e(\delta, T) \rightarrow \gamma_{eT}; \\ F_e(\delta, T) &\rightarrow -\frac{1}{2} \beta_0 T_\Phi T \ln \left(\frac{T}{T_\Phi \delta^{\gamma_{eT}}} \right); \\ C_{Ve} &\rightarrow \frac{1}{2} \beta_0 T_\Phi \end{aligned} \right\} \text{при } T \rightarrow \infty,$$

где $C_{Ve} = (\partial E_e / \partial T)_P$ – изохорная теплоемкость электронов.

Таким образом, при низких температурах электронный газ ведет себя как полностью вырожденный – $C_{Ve} \sim T$, а энергия $E_e \sim T^2$, при высоких температурах это свободный электронный газ – $C_{Ve} = \text{const}$, $E_e \sim T$. Параметр T_Φ имеет смысл температуры Ферми и является подгоночным. Так как при $T \rightarrow \infty$ теплоемкость полностью ионизованного электронного газа $C_{Ve} = (3RZ)/(2A)$, то T_Φ определяется с использованием соотношения: $T_\Phi = (3RZ)/(\beta_0 A)$, что обеспечивает выполнение правильного асимптотического значения C_{Ve} при $T \rightarrow \infty$.

При $T = 0$ из выражения (27) следует $f_e = f_{e0}(\delta)$, и из формулы (28) получим

$$\Gamma_e(\delta, T = 0) = \Gamma_{e0}(\delta) = \frac{df_{e0}(\delta)}{d\delta} \delta \ln \delta + f_{e0}(\delta). \quad (29)$$

Для функции $\Gamma_{e0}(\delta)$, как и для коэффициента Грюнайзена ядер используется зависимость вида

$$\Gamma_{e0}(\delta) = A_e + \frac{(\gamma_{1e} - A_e)}{1 + (\delta/\delta_{me})^{a_e}} + \frac{(\gamma_{2e} - A_e)}{1 + (\delta/\delta_{ne})^{-b_e}}. \quad (30)$$

Данный вид зависимости обеспечивает следующие предельные переходы:

$$\text{при } \delta \rightarrow 0: \Gamma_{e0}(\delta) \rightarrow \gamma_{1e}; \quad \text{при } \delta \rightarrow \infty: \Gamma_{e0}(\delta) \rightarrow \gamma_{2e}.$$

Выполнение условия $\Gamma_{e0}(\delta = 1) = \gamma_{e0}$, где γ_{e0} – значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях, обеспечивается за счет коэффициента A_e , который связан с другими параметрами зависимости (30) следующим соотношением:

$$A_e = \frac{\gamma_{0e} - \frac{\gamma_{1e}}{1 + (\delta_{me})^{-a_e}} - \frac{\gamma_{2e}}{1 + (\delta_{ne})^{b_e}}}{1 - \frac{1}{1 + (\delta_{me})^{-a_e}} - \frac{1}{1 + (\delta_{ne})^{b_e}}}$$

Параметры a_e , b_e , δ_{me} , δ_{ne} отвечают за скорость выхода функции $\Gamma_{e0}(\delta)$ на асимптотики. Таким образом, зависимость (30) содержит всего семь подгоночных параметров.

Из соотношения (29) можно записать

$$f_{e0}(\delta) = \gamma_{1e} + \gamma_{2e} - A_e - \frac{(\gamma_{1e} - A_e)}{a_e \ln \delta} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{me})^{a_e}}{1 + (\delta_{me})^{-a_e}} \right) + \frac{(\gamma_{2e} - A_e)}{b_e \ln \delta} \ln \left(\frac{1 + (\delta/\delta_{ne})^{-b_e}}{1 + (\delta_{ne})^{b_e}} \right), \quad (31)$$

В точке $\delta = 1$ функция $f_{e0}(\delta)$ вида (31) имеет неопределенность (деление 0 на 0). Для ее вычисления в окрестности данной точки используется алгоритм, основанный на разложении ее в ряд в окрестности этой точки.

Для рассматриваемой модели уравнения состояния из условий $\delta \rightarrow \delta_{\max}$, $P \rightarrow \infty$, $T \rightarrow \infty$ можно получить соотношение, связывающее максимальное сжатие металла на ударной адиабате δ_{\max} с другими параметрами уравнения состояния

$$\delta_{\max} = 2 \frac{C_{V0} + \beta_0 T_{\Phi}}{C_{V0} \gamma_{\Phi} + \beta_0 T_{\Phi} \gamma_{eT}} + 1.$$

При подборе параметров подгоночным (задаваемым) является параметр δ_{\max} , а параметр γ_e вычисляется по формуле

$$\gamma_{eT} = \frac{1}{\beta_0 T_{\Phi}} \left(2 \frac{C_{V0} + \beta_0 T_{\Phi}}{\delta_{\max} - 1} - C_{V0} \gamma_{\Phi} \right). \quad (32)$$

Выражение для свободной энергии, соответствующее (25), (26), имеет вид

$$F_e(\delta, T) = -\frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} T \ln \left(1 + \frac{T}{T_{\Phi} \delta^{f_e(\delta, T)}} \right).$$

Энтродия электронов

$$S_e(\delta, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T_{\Phi} \times \left[\left(1 - T \left(\frac{\partial f_e}{\partial T} \right)_{\delta} \ln \delta \right) \frac{T}{T_{\Phi} \delta^{f_e(\delta, T)} + T} + \ln \left(1 + \frac{T}{T_{\Phi} \delta^{f_e(\delta, T)}} \right) \right].$$

Полная энтропия рассчитывается по формулам

$$S(\delta, T) = S_p(\delta, T) + S_e(\delta, T) + S_0,$$

где $S_0 = S_{298}^0 - S_p(\delta = 1, T = T_0) - S_e(\delta = 1, T = T_0)$ обеспечивает нормировку энтропии на стандартное значение S_{298}^0 при нормальной температуре; T_0 – значение температуры при нормальных условиях.

С использованием описанной модели разработано уравнение состояния Al. Параметры уравнения состояния можно разделить на три группы. Первая группа – это параметры, используемые при расчете потенциальных составляющих. К ним относятся коэффициенты зависимости $P_x(\delta)$ (3) для расчета в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$, коэффициенты сплайна (12) для расчета в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$, значение δ_c – точки начала сшивки с холодной кривой, рассчитанной по модели ТФП, атомная масса A и атомный номер Z вещества для расчета P_x по модели ТФП и коэффициенты зависимости (15) для расчета $P_x(\delta)$ в диапазоне $\delta > \delta_c$.

Для расчета по уравнениям (10), (11) таблицы зависимостей $P_x(\delta)$ в области, где известна ударная адиабата, использована $D(U)$ зависимость, полученная в результате аппроксимации экспериментальных данных для алюминия [6–10]

$$D(U) = C_0 + C_1 U + \frac{C_2 U}{U + C_3} + C_4 \sin \left(C_5 + C_6 \left(1 - e^{-C_7 U} \right) \right), \quad (33)$$

где $C_0 = 5,219$ км/с, $C_1 = 1,01$ (ед), $C_2 = 7$ км/с, $C_3 = 14,2$ км/с, $C_4 = 0,082$ км/с, $C_5 = 1,55$ (ед), $C_6 = 11,92$ (ед), $C_7 = 0,12$ с/км. Отсюда следует значение скорости звука при нормальных условиях, определенное по результатам ударно-волновых экспериментов – $D(U = 0) = 5,301$ км/с.

Для точки начала сшивки зависимости $P_x(\delta)$, рассчитываемой из $D(U)$, с зависимостей $P_x(\delta)$, рассчитываемой по модели ТФП [2], выбрано значение сжатия $\delta_c = 2,7$. Значения параметров зависимостей (3) и (4) частично определяются из условий сшивки до второй производной потенциального давления в точке $\delta = 1$ и нормировки на энергию сублимации (связи). Значения P_x в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ рассчитываются автоматически на стадии подбора тепловых параметров по заданной $D(U)$ зависимости на ударной адиабате сплошных образцов. Получаемая таким образом табличная зависимость $P_x(\delta)$ аппроксимируется с помощью сплайнов (12), (13) с достаточной точностью с использованием четырех узлов на участке $(1, \delta_c)$. Значения коэффициентов b_i зависимости (14), (15) также однозначно определяются значениями сшиваемых функций в точке δ_c . Подгоночными являются: коэффициенты m и l зависимости (3), точка сшивки δ_c и параметр интерполяционной функции α .

Данные о коэффициенте Грюнайзена решетки γ_0 и изохорической теплоемкости решетки C_{V0} при нормальных условиях, энергии связи Q_{cb} приведены в специальной литературе (см., например, [11]). Значение теплоемкости также можно оценить, используя закон Дюлонга – Пти. Параметр ψ_{P0} может быть оценен по соотношению $\psi_{P0} = Q_{cb}/C_{V0}$.

Если применить отмеченную в [5] закономерность к зависимости $C_V(\rho, T)$ вида (21), то получим диапазон $\psi_{P0} \approx (20 \div 30)T_{m0}$. Значение температуры Дебая приведено в справочной литературе (например, [11]). Значение ψ_{P0} и остальных параметров, относящихся к расчету вклада атомов, подобраны из условия наилучшего описания всей совокупности экспериментальных данных.

Известна формула для теоретической оценки величины коэффициента электронной теплоемкости β_0 (см., например, [12]). Известны справочные данные для β_0 (например, [11]). Коэффициент β_0 можно оценить, используя экспериментальные данные о зависимости теплоемкости от температуры. Параметр γ_{eT} определяется с использованием соотношения (32). Величина δ_{\max} находится из расчетов ударной адиабаты по модели ТФПК [2, 13] в области сверхвысоких давлений, не исследованной в экспериментах.

Для расчета термодинамических функций по модели достаточно задать 44 параметра, из которых подгоночными являются максимум 23. Остальные однозначно определяются по имеющимся экспериментальным и справочным данным (ρ_0, A, Z, \dots) или автоматически насчитываются на стадии подбора параметров (T_ϕ, γ_{eT} , коэффициенты сплайна, ...). Значения подгоночных параметров определяются при поиске минимума функционала среднеквадратичного отклонения термодинамических величин, рассчитанных по УРС, от соответ-

ствующих экспериментальных данных или данных, полученных с помощью теоретических моделей

$$\Omega(\{\tilde{x}_i\}) = \sum_{j=1}^m \frac{W_j}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} w_i \frac{(\tilde{x}_i - x_i)^2}{x_i^2}.$$

Здесь m – число типов данных; n_j – число данных одного типа; w_i – вес вклада i -й разности в функционал; W_j – вес вклада данных j -го типа в функционал; \tilde{x}_i – величины, рассчитанные по УРС; x_i – соответствующие им экспериментальные или рассчитанные по теоретическим моделям данные. Весовые множители определяют: w_i – степень доверия к конкретным данным; W_j – важность описания данных конкретного типа.

Подобранные параметры уравнения состояния алюминия приведены в табл. 1.

На рис. 1 в координатах плотность – температура представлены расчетные и экспериментальные данные по изобарной теплоемкости и тепловому расширению алюминия. Экспериментальные данные [14, 15] по тепловому расширению до температуры плавления алюминия хорошо описываются расчетами по УРС данной работы. В среднем описание расчетом по УРС экспериментальных данных для $C_p(T)$ из [14, 16] хорошее.

Таблица 1

Параметры уравнения состояния алюминия

Символ	Название	Значение	Размерность
ρ_0	Плотность при нормальных условиях	2,71	г/см ³
C_0	Скорость звука при нормальных условиях	5,301	км/с
$Q_{св}$	Энергия сублимации (связи)	11,8	кДж/г
m	Параметры P_x при $\delta < 1$	10	1
l		8,5	1
δ_1	Значения δ и P_x в узлах сплайна	1,21	1
P_{x_1}		20,726	ГПа
δ_2		1,57	1
P_{x_2}		89,445	ГПа
δ_3		1,86	1
P_{x_3}		185,67	ГПа
δ_4		2,37	1
P_{x_4}		412,42	ГПа
$\delta_5 = \delta_c$	Значение δ и P в точке начала сшивки зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной по ударной адиабате, с расчетами по модели ТФП	2,7	1
$P_c = P_{x_5}$		595,34	ГПа
P'_c	$(dP_x/d\delta)_{\delta=\delta_c}$	578,75	ГПа
A	Атомная масса	26,98	1
Z	Атомный номер	13	1
α	Параметр, отвечающий за “скорость перехода” на расчет $P_x(\delta)$ по модели ТФП	1	1
C_{v0}	Теплоемкость при нормальных условиях	$9,4 \cdot 10^{-4}$	кДж/(г·К)

Символ	Название	Значение	Размерность
ψ_{p0}	Значение функции $\psi_p(\delta)$ при $\delta = 1$	20400	К
γ_{0p}	Коэффициент Грюнаизена решетки при $T = 0, \delta = 1$	2,15	1
γ_{1p}	Коэффициент Грюнаизена решетки при $T = 0, \delta \rightarrow 0$	0,5	1
γ_{2p}	Коэффициент Грюнаизена решетки при $T = 0, \delta \rightarrow \infty$	0,5	1
a_p	Параметры, определяющие скорость выхода функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотические значения при $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$	3,54	1
b_p		3,27	1
δ_{mp}		0,787	1
δ_{np}		0,893	1
γ_ϕ	Параметр, определяющий асимптотическое значение коэффициента Грюнаизена решетки при $T \rightarrow \infty$	0,67	1
T_{m0}	Экспериментальное значение температуры в точке плавления при $P = 1$ атм	933	К
δ_{m0}	Экспериментальное значение δ в точке плавления при $P = 1$ атм	0,941	1
θ_0	Температура Дебая при $\delta = 1$ и $T = 0$	378	К
β_0	Коэффициент электронной теплоемкости	$3,5 \cdot 10^{-8}$	кДж/(г·К ²)
γ_{0e}	Коэффициент Грюнаизена электронов при $T = 0, \delta = 1$	0,693	1
γ_{1e}	Коэффициент Грюнаизена электронов при $T = 0, \delta \rightarrow 0$	0,237	1
γ_{2e}	Коэффициент Грюнаизена электронов при $T = 0, \delta \rightarrow \infty$	0,522	1
a_e	Параметры, определяющие скорость выхода функции $\Gamma_{e0}(\delta)$ на асимптотические значения при $\delta \rightarrow 0$ и $\delta \rightarrow \infty$	2,57	1
b_e		2,43	1
δ_{me}		0,443	1
δ_{ne}		0,675	1
δ_{max}	Значение максимального сжатия на ударной адиабате	5,06	1
T_g	Параметры, отвечающие за скорость выхода коэффициента Грюнаизена электронов на асимптотическое значение при $T \rightarrow \infty$	930000	К
k_e		0,107	1
S_{298}^0	Значение энтропии при нормальных условиях	$1,05 \cdot 10^{-3}$	кДж/(г·К)

Примечание. Расчетное значение кристаллической плотности алюминия, соответствующее точке пересечения зависимости $P_x(\delta)$ с линией $P = 0$: $\rho_{0k} = 2,744$ г/см³. При нормальных условиях в точке $\rho = \rho_0, P = 1$ атм, начальная энергия $E_0 = 0,16655$ кДж/г. Значение коэффициента Грюнаизена электронов при $T \rightarrow \infty$ $\gamma_{et} = 0,479$.

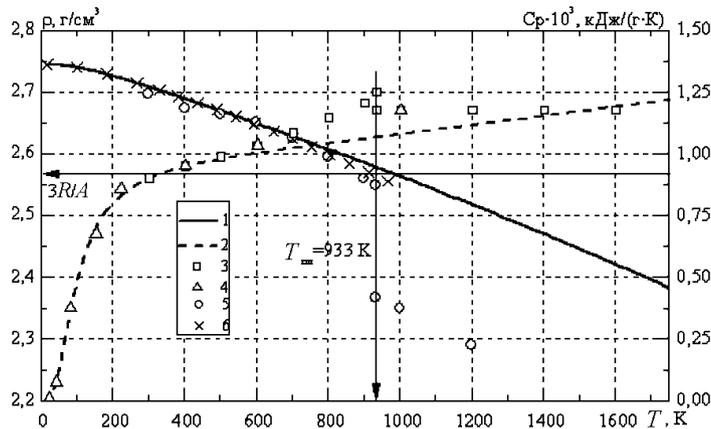


Рис. 1. Зависимости плотности и теплоемкости алюминия от температуры при нормальном давлении. Расчет по УРС данной работы: 1 – тепловое расширение; 2 – теплоемкость. Эксперимент: 3, 4 – по теплоемкости из [14, 16]; 5 – по тепловому расширению из [14]; 6 – аппроксимация данных по тепловому расширению из [15]

На рис. 2 в координатах давление – плотность представлены нормальные изотермы ($T = 293$ К): рассчитанная по УРС данной работы и рекомендованная в [17]. Для сравнения на рис. 2 приведена также нормальная изотерма, рассчитанная по УРС [18]. С повы-

шением давления нормальная изотерма, рассчитанная по УРС данной работы, асимптотически приближается к расчетам по теоретической модели ТФП [2], при $P > \sim 3 \cdot 10^4$ ГПа они практически совпадают.

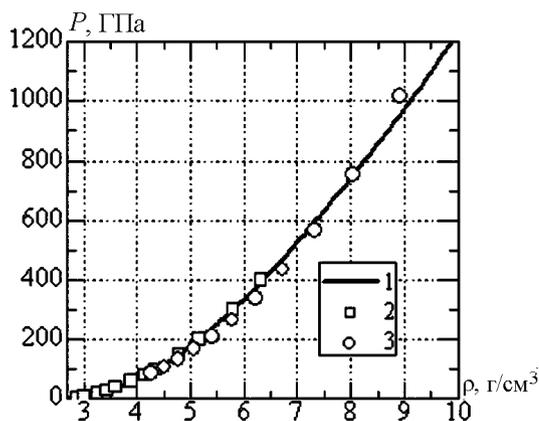


Рис. 2. Нормальные изотермы алюминия: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – нормальная изотерма, рекомендованная в [17]; 3 – расчет по УРС [18]

На рис. 3 в координатах давление – плотность показаны ударные адиабаты сплошного алюминия, рассчитанные по УРС данной работы, КСМ [19], ТФПК [2, 13]. Там же приведены и экспериментальные данные [6–10]. В экспериментально исследованной области расчеты по УРС данной работы хорошо согласуются с экспериментальными данными [6–10], в области больших давлений, до плотности $\rho \sim 13,5 \text{ г/см}^3$, согласуются с расчетами по теоретическим моделям КСМ и ТФПК.

Результаты сравнения описания экспериментальных данных расчетами по $D(U)$ соотношениям представлены на рис. 4. На оси ординат даны значения относительных отклонений скорости фронта ударной волны D , измеренной в эксперименте или рассчитанной по УРС [20] или $D(U)$ соотношениям [7, 21], от скорости D , рассчитанной по зависимости (33). Представленные на рис. 4 результаты показывают, что, в среднем, лучшее описание экспериментальных данных достигается зависимостью (33).

На рис. 5 в координатах давление – плотность приведены рассчитанные по УРС данной работы в диапа-

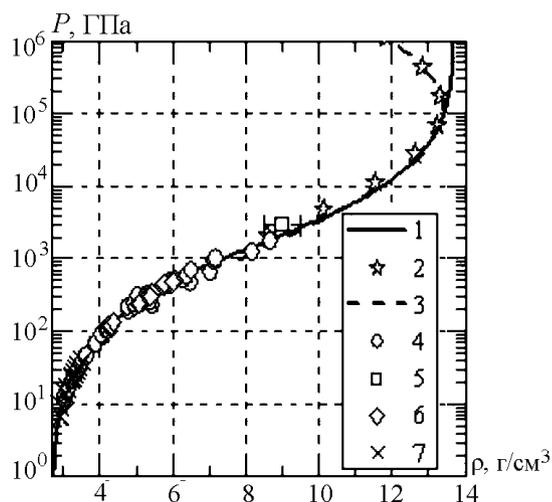


Рис. 3. Ударные адиабаты сплошного алюминия ($\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$). Расчет: 1 – УРС данной работы; 2 – КСМ [19]; 3 – модель ТФПК [2, 13]. Экспериментальные данные: 4 – [7]; 5 – [8]; 6 – [9, 10]; 7 – [6]

зоне $4,75 \text{ г/см}^3 \leq \rho \leq 6,5 \text{ г/см}^3$ ударные адиабаты сплошного алюминия в исходном состоянии с $T = 293 \text{ К}$, $P = 1 \text{ атм}$ и с $T = 10 \text{ К}$, $P = 1 \text{ атм}$. Там же приведены взятые из [9, 22] экспериментальные данные по исследованию ударных адиабат сплошного охлажденного алюминия. Рис. 6 демонстрирует положение рассчитанных по УРС данной работы ударных адиабат алюминия с начальной плотностью ρ_{00} : 1,9; 1,31; 0,91; 0,34 г/см^3 . Расчеты ударных адиабат хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Хорошее описание нашим уравнением состояния экспериментальных данных, полученных при исследовании повторных (вторых) ударных адиабат [7, 23] и адиабат расширения [10] алюминия в координатах давление – массовая скорость, продемонстрировано на рис. 7.

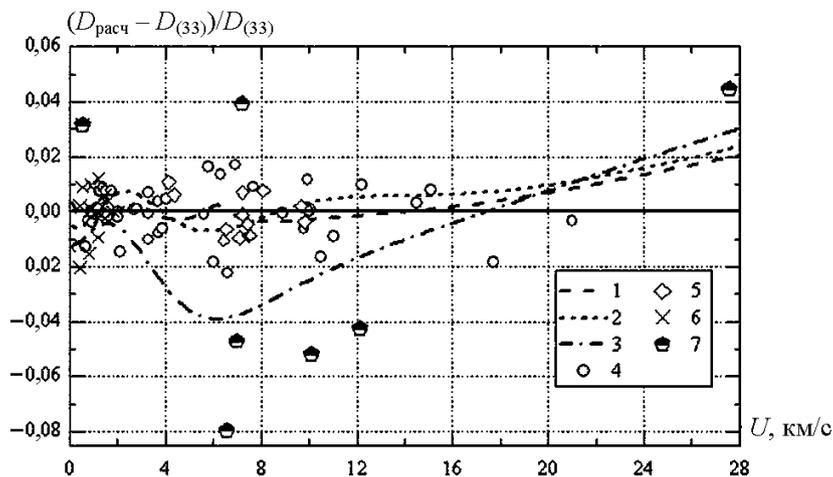


Рис. 4. Относительные отклонения расчетных и экспериментальных значений скорости ударной волны от $D(U)$ зависимости, рассчитанной по УРС данной работы. Расчет: 1 – по $D(U)$ зависимости из [7]; 2 – [20]; 3 – [21]. Экспериментальные данные: 4 – [7]; 5 – [9, 10]; 6 – [6]; 7 – данные из [6, 7] и [8], не использованные при подборе параметров $D(U)$ зависимости

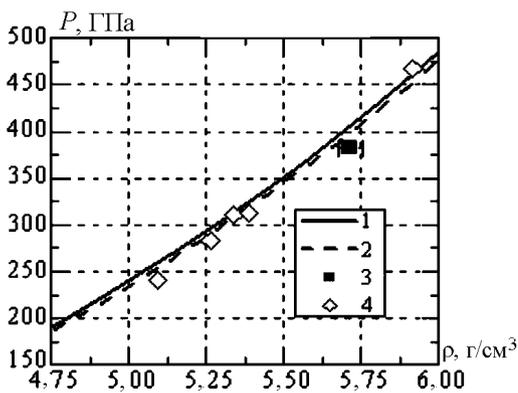


Рис. 5. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах сплошного охлажденного алюминия в диапазоне $4,75 \leq \rho \leq 6 \text{ г/см}^3$. Расчет по УРС данной работы из состояния: 1 – $T = 293 \text{ К}$, $P = 1 \text{ атм}$; 2 – $T = 10 \text{ К}$, $P = 1 \text{ атм}$. Экспериментальные данные охлажденного алюминия: 3 – $T = 10 \text{ К}$ [22]; 4 – $T = 22 \text{ К}$ [9]

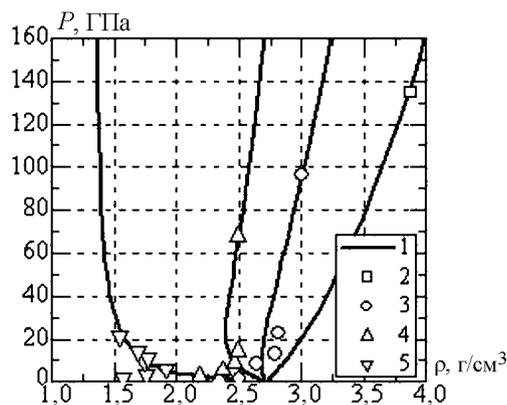


Рис. 6. Зависимости давления от плотности на ударных адиабатах пористого алюминия. 1 – расчет по УРС данной работы. Эксперимент [7]: 2 – $\rho_{00} = 1,9 \text{ г/см}^3$; 3 – $\rho_{00} = 1,3 \text{ г/см}^3$; 4 – $\rho_{00} = 0,91 \text{ г/см}^3$; 5 – $\rho_{00} = 0,34 \text{ г/см}^3$

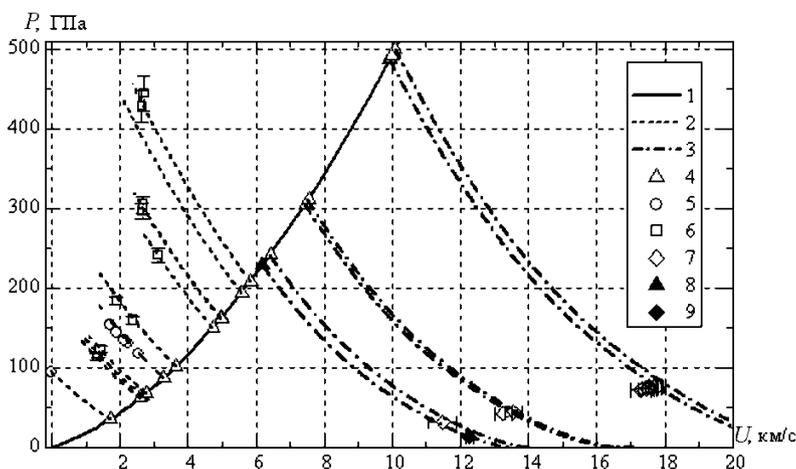


Рис. 7. Зависимости давления от массовой скорости на ударных адиабатах и изэнтропах расширения сплошного алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – ударная адиабата; 2 – ударные адиабаты повторного сжатия; 3 – изэнтропы расширения. Экспериментальные данные: 4 – начальные состояния за фронтом первой ударной волны для повторных адиабат и изэнтроп расширения [7, 10, 23]; 5, 6 – состояния на ударных адиабатах повторного сжатия [7, 23]; 7 – состояния на изэнтропах расширения [10]; 8, 9 – состояния на ударной адиабате и на изэнтропе приведенные в табл. 2

На этом же рисунке представлены экспериментальные и расчетные данные о положении адиабаты расширения алюминия (АД1) в аэрогель (SiO_2) с плотностью $0,08 \text{ г/см}^3$ из состояния на ударной адиабате соответствующего $P = 229,71 \text{ ГПа}$. В опыте использовался полусферический генератор ударных волн МЗ-4 [24]. Скорость фронта ударной волны в экране (алюминий АД1) генератора ударных волн определена с использованием электроконтактных датчиков. Измерение средней скорости ударной волны в аэрогеле выполнено с использованием кварц-полимерного световода с диаметром сердцевины 400 мкм . Излучение фронта ударной волны направлялось в высокоскоростной пирометр, регистрирующий излучение на длинах волн $406, 498, 550$ и 600 нм . При измерении скорости ударной волны использовался эффект отсечки излучения при выходе ударной волны на торец световода.

Массовая скорость U определена с использованием соотношения $D = -0,03388 + 1,13734 \cdot U$ ($2 < U \text{ км/с} < 12$), полученного в результате аппроксимации экспериментальных данных из работ [7, 25–27] для аэрогелей с начальной плотностью, изменяющейся в диапазоне $0,008\text{--}0,36 \text{ г/см}^3$. Экспериментальные данные для этой адиабаты приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры на адиабате расширения ударно сжатого сплошного алюминия

Образец (алюминий АД1)			Преграда	
ρ_0 , г/см ³	P , ГПа	U , км/с	Материал	D , км/с
2,71	229,71	6,21	Алюминий ($\rho_0 = 2,71 \text{ г/см}^3$)	13,65
2,71	13,64	$12,26 \pm 0,12$	Аэрогель, SiO_2 ($\rho_{00} = 0,08 \text{ г/см}^3$)	13,91

Зависимость изэнтропической скорости звука в ударно сжатом алюминии от плотности, рассчитанная по УРС данной работы и экспериментальные данные из [7], приведены на рис. 8. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными в пределах их ошибки.

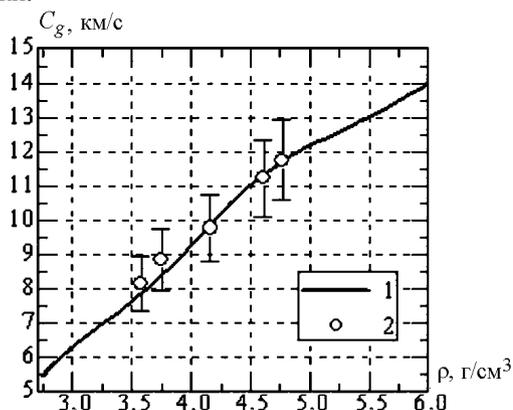


Рис. 8. Зависимость изэнтропической скорости звука в алюминии от плотности на ударной адиабате: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – эксперимент [7]

Рассчитанная по УРС данной работы зависимость скорости разлета ударно сжатого сплошного алюминия в воздух от массовой скорости на ударной адиабате показана на рис. 9. Там же приведены и экспериментальные данные из [7]. Точками *a* и *b* на рис. 9 обозначены состояния на ударной адиабате, при разгрузке из которых в воздух температура алюминия равна температуре плавления (разлет из состояния в точке *a*) и температуре кипения (разлет из состояния в точке *b*). Для повышения точности описания экспериментальных данных необходимо учесть изменение термодинамических функций при плавлении.

На рис. 10, 11 приведены рассчитанные по УРС данной работы зависимости $T(P)$, $T(\rho)$ на ударной адиабате и линии плавления. Из результатов расчетов следует, что в точке пересечения линии плавления с ударной

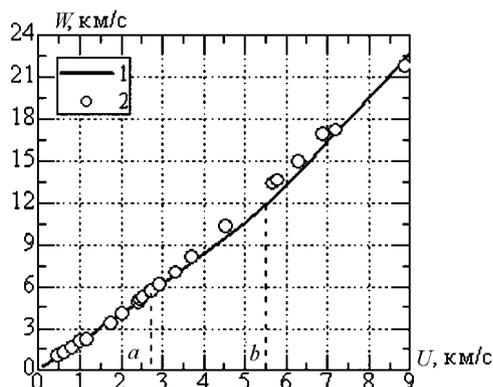


Рис. 9. Зависимости скорости разлета в воздух от массовой скорости на ударной адиабате сплошного алюминия: 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – эксперимент [7]; *a* – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру плавления; *b* – состояние на ударной адиабате, при разгрузке из которого в воздух алюминий имеет температуру кипения

адиабатой алюминия $P \approx 118$ ГПа, $T \approx 4500$ К, $\rho \approx 4,32$ г/см³. На рис. 10 также приведены результаты расчетов по другим уравнениям состояния параметров плавления на ударной адиабате [18, 28, 29]. Там же приведены экспериментальные данные, полученные на линии плавления, и результаты расчетов по приведенной в [30] зависимости $T(P)$, аппроксимирующей экспериментальные данные. Расчет по зависимости из [30] дает на 5–10 % большие значения температуры, чем расчеты по УРС данной работы. Аналогичные отклонения наблюдаются и в приведенной на рис. 11 зависимости $T(\rho)$. Возможно, это является следствием неточности используемой нами модели плавления, основанной на законе Линдемана.

В табл. 3 представлены данные о параметрах критической точки и точки кипения алюминия. Параметры критической точки, рассчитанные по УРС данной работы, согласуются со средними значениями этих параметров, приведенными в разных источниках.

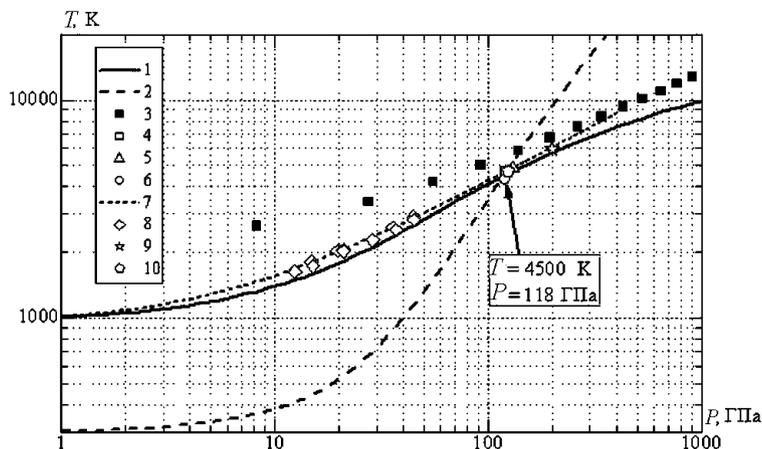


Рис. 10. Зависимости температуры от давления на ударной адиабате и на линии плавления алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – на линии плавления; 2 – на ударной адиабате. Расчет по другим УРС: 3 – ТФПК [2, 13], 4 – [28] (начало плавления); 5 – [18] (начало плавления); 6 – [29]. Расчет линии плавления по аппроксимационной зависимости из [30] – 7. Экспериментальные данные на линии плавления, приведенные в [30] – 8, 9, 10

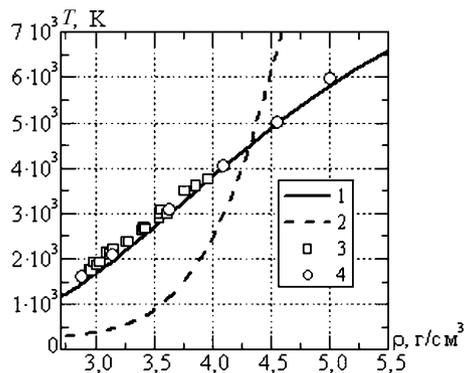


Рис. 11. Зависимости температуры от плотности на ударной адиабате и на линии плавления алюминия. Расчет по УРС данной работы: 1 – на линии плавления; 2 – на ударной адиабате. Экспериментальные данные на линии плавления, приведенные в [36] – 3. Расчетные данные на линии плавления, приведенные в [36] – 4

Таблица 3

Параметры критической точки и точки кипения алюминия

Параметры точки кипения		Параметры критической точки			
Температура $T_{\text{кип}}$, К	Плотность $\rho_{\text{кип}}$	Плотность $\rho_{\text{кр}}$	Температура $T_{\text{кр}}$, К	Давление $P_{\text{кр}}$, ГПа	Энтропия $S_{\text{кр}}$, кДж/г·град
	г/см ³				
Данные из разных источников					
2333 [11]	–	0,4027 [34]	4744 [34]	0,1717 [34]	–
2740 [31]	–		8550 [34]		
2793 [32]	–	0,5996 [34]	7400 [34]	0,4154 [34]	–
2593±50 [33]	–		7740 [34]		
		0,6918 [34]	7151 [34]	0,5458 [34]	–
			8480 [34]		
		0,64 [35]	8000 [35]	0,447 [35]	0,005205 [35]
Результаты расчета по УРС данной работы					
2590	2,16	0,6599	7917	0,4674	0,005167

Приведенные в статье результаты сравнения расчетов по уравнению состояния с экспериментальными данными и расчетами по другим УРС показывают, что в данном классе моделей (не учитывающих плавление и полиморфные фазовые переходы) разработанное уравнение состояния хорошо описывает экспериментальные данные.

Список литературы

1. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В.К. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
2. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
3. Kerley G. I. User's Manual for PANDA: A Computer Code for Calculating Equations of State, Los Alamos National Laboratory report LA-8833-M (November 1981).
4. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной теплоемкостью ядер и электронов // ВАНТ. Сер.: Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 57–62.
5. Grover Richard. Liquid Metal Equation of State Based on Scaling // Chemical Physics. 1971. Vol. 55, №7. P. 3435–3441.

6. LASL Shock Hugoniot Data. University of California press. Berkeley. Los Angeles. London. 1980. P. 658.

7. Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.

8. Ragan III C. E. Shock-wave experiments at three-fold compression // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29, № 3. P. 1391–1402.

9. Knudson M. D., Lemke R. W., Hayes D. B., Hall C. A., Deeney C., Asay J. R. Near-Absolute Hugoniot measurements in aluminum to 500 GPa using a magnetically accelerated flyer technique // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94, № 7. P. 4420–4431.

10. Knudson M. D., Asay J. R., Deeney C. Adiabatic release measurements in aluminum from 240- to 500-GPa states on the principal Hugoniot // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 97. 073514–1–073514–14.

11. Karl A. Gschneider. Physical Properties and Interrelationships of Metallic and Semimetallic Elements // Solid State Physics. 1964. Vol. 16. P. 275–426.

12. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.

13. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1978.
14. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.
15. Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
16. Физические величины. Справочник / Под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
17. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Кузьменков Е. А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // ПТМФ. 1987, № 1.
18. Nellis W. K., Moriarty J. A., Mitchell A. C., Ross M., Dandrea R. G., Ashcroft N. W., Holmes N. C., Gathers G. R. Metals Physics at Ultrahigh Pressure: Aluminium, Copper, and Lead as Prototypes // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 60, No. 14. P. 1414–1417.
19. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Квантостатистические адиабаты пористых веществ // Математическое моделирование. 1998. Т. 10, № 7. С. 111–123.
20. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г. Модель уравнения состояния с переменной теплоемкостью ядер и электронов с учетом температуры Дебая. Уравнения состояния бериллия и алюминия. // ВАНТ. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 1–2. С. 51–64.
21. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Фунтиков А. И. Главные ударные адиабаты 10 металлов // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 10. С. 27–42.
22. Белов С. И., Борисков Г. В., Быков А. И., Илькаев Р. И., Лукьянов Н. Б., Матвеев А. Я., Михайлова О. Л., Селемир В. Д., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф., Трусков И. П., Урлин В. Д., Фортков В. Е., Шуйкин А. Н. Ударно-волновое сжатие твердого дейтерия // Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 76. Вып. 7. С. 508–510.
23. Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A. Equation-of-state measurements for aluminium, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93, No. 1. P. 304–310.
24. Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Крупников К. К., Панов Н. В. Взрывные экспериментальные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах // УФН. 1996. Т. 166, № 5. С. 575–581.
25. Грязнов В. К., Николаев Д. Н., Терновой В. Я., Фортков В. Е., Филимонов А. С., Килер Н. Генерация неидеальной плазмы путем ударно-волнового сжатия высокопористого аэрогеля // Химическая физика. 1988. Т. 17, № 2. С. 33–37.
26. Vildanov V. G., Gorshkov M. M., Slobodenjukov V. M., Rushkovan E. N. Shock compression of low initial quartz at pressures up to 100 GPa // In: Shock compression of condensed Matter. 1995. Seattle, Washington: Proc. Am. Phys. Society Topical Group, August 13–18, 1996. P. 121–124.
27. Nikolaev D. N., Fortov V. E., Filimonov A. S., Kvitov S. V., Ternovoi V. Ya. SiO₂-aerogel properties in the energy up to 65 kJ/g // In: Shock compression of condensed Matter. 1999. Amer. Inst. of Phys.: NY, 2000. P. 121–124.
28. Chengda Dai, Hua Tan, Huayun Geng. Model for assessing the melting on Hugoniot of Metals: Al, Pb, Cu, Mo, Fe, and U // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 92, No. 9. P. 5019–5026.
29. Медведев А. Б. Модификация модели Ван-дер-Ваальса для плотных состояний // Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В. Е. Форткова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. М.: Наука, 2000. С. 315–341.
30. Chisolm E. D., Scott D. C., Duane C. W. Test of theoretical equation of state for elemental solids and liquids // Phys. Rev. Ser. B. 2003. Vol. 68. P. 104103–1–104103–12.
31. Элементы: Справочник / Под ред. Дж. Эмсли. М.: Мир. 1993.
32. Свойства элементов: Справочник / Под ред. М. Е. Дрица. М.: Металлургия. 1985.
33. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат. 1968.
34. Roland W. Ohse, Hilmar von Tippelskirch. The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures (*A review*) // High Temperatures-High Pressures. 1977. Vol. 9. P. 367–385.
35. Фортков В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А. Оценка параметров критической точки // Теплофизика высоких температур. 1975. Т. 13, № 5. С. 1072–1080.
36. Burakovsky L., Greeff C. W., Preston D. L. Analytic model of the shear modulus at all temperatures and densities // Phys. Rev. Ser. B. 2003. Vol. 67. P. 094107–1–094107–9.

Статья поступила в редакцию 28.10.2005

УТОЧНЕНИЕ КОНСТАНТ k - ε МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРЯМОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОСТЕЙШИХ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ И ИЗМЕРЕНИЙ

А. Р. Гужова, А. С. Павлушин, В. П. Стаценко
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Приводятся результаты расчета с помощью k - ε модели турбулентности автомодельных режимов простейших турбулентных течений. Оптимизация эмпирических коэффициентов модели производится с помощью предложенных авторами приближенных аналитических решений. Результаты расчетов по k - ε модели сравниваются с результатами проведенного ранее прямого 3D численного моделирования и известными экспериментальными данными.

Введение

Как и в любой феноменологической модели турбулентности, в k - ε модели имеется набор полуэмпирических коэффициентов. Обычно их находят, обращаясь к простейшим течениям. Мы рассматриваем автомодельную стадию таких течений, поскольку на этой стадии исключается влияние начальных условий или других факторов, вносящих дополнительные параметры в описание течения.

Задача о турбулентном перемешивании под действием постоянной силы тяжести (постоянного ускорения) на плоской границе раздела двух несжимаемых жидкостей (газов) исследована экспериментально в ряде работ [1–6].

Эта задача исследовалась также численно в ряде работ [4,7–11] с помощью прямого двумерного и трехмерного численного моделирования. Расчеты, выполненные на достаточно подробной сетке, приводят к заметно меньшим приведенным скоростям роста зоны турбулентного перемешивания (ЗТП), чем полученные в опытах авторами [1–6]. Как показано в докладе [10], это расхождение объясняется тем обстоятельством, что при обработке измерений с большим весом входил начальный неавтомодельный временной интервал. Аналогичные данные приведены в докладе Вебера [11].

Другой пример успешного использования прямого двумерного и трехмерного численного моделирования турбулентных течений – задача о сдвиге перемешивания в плоском слое смешения, рассмотренная в [12–14], что позволило описать соответствующие экспериментальные данные [15–17], которые, по-видимому, более детальны и надежны, чем данные [1–6] для гравитационного перемешивания.

Таким образом, в данное время более обоснованными представляются результаты прямого трехмерного численного моделирования. Отметим, что они также являются более представительными, поскольку кроме ширины ЗТП, измеряемой в опытах, позволяют также находить профили турбулентной энергии, турбулентного потока массы, квадратичных пульсаций плотности и анизотропии тензора Рейнольдса.

В то же время имеющиеся феноменологические модели [18–25] как анизотропной ([19, 20, 22]), так и изотропной ([18, 21, 23–25]) турбулентности содержат полуэмпирические коэффициенты, при выборе которых предпочтение ранее отдавалось экспериментальным данным.

В данной работе сделана попытка подбора указанных коэффициентов для k - ε модели турбулентности [23–25], исходя из результатов прямого трехмерного численного моделирования указанных задач. При этом кроме интегральной величины (приведенной ширины ЗТП) сравнивались профили различных моментов пульсаций скорости и плотности.

Кроме того, изменение указанных коэффициентов сказывается на результатах расчета с помощью k - ε модели других простейших автомодельных течений: гравитационное перемешивание легкого (тяжелого) плоского слоя, перемешивание в пристеночном турбулентном пограничном плоском слое и т. д. Для них прямое численное моделирование пока выполнено лишь на грубой сетке, поэтому сравнение результатов расчета по k - ε модели проводится в основном с соответствующими измерениями [26–28].

1. Основные уравнения k - ε модели изотропной турбулентности

Уравнения газодинамики при наличии турбулентного перемешивания имеют следующий вид:

уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0; \quad (1)$$

уравнение движения:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_i u_k) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + g_i \rho, \quad (2)$$

\vec{g} – ускорение силы тяжести. Полный тензор вязких напряжений $\sigma_{ik} \equiv \sigma_{ikM} + \sigma_{ikT}$ включает молекулярный тензор вязких напряжений

$$\sigma_{ijM} = \rho \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ji} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (3)$$

где $\nu = \nu(\rho, T)$ – кинематический коэффициент молекулярной вязкости. Ниже рассмотрим лишь задачи с пренебрежимо малой вязкостью (бесконечно большие числа Рейнольдса).

Тензор напряжений Рейнольдса $\sigma_{ijT} \equiv -\overline{\rho u'_i u'_j}$ аппроксимируем как обычно

$$\sigma_{ijT} = \rho D \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ji} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) - P_T \delta_{ji}, \quad (4)$$

здесь турбулентное давление

$$P_T = \frac{2}{3} \rho k; \quad (5)$$

k – турбулентная энергия. Коэффициент турбулентной вязкости

$$D = c_D \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (6)$$

ε – скорость диссипации турбулентной энергии.

Уравнение для удельной энергии $e = e(\rho, T)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_n}(\rho u_n e - P a_n + Q_n^T + q_n) = \\ = \rho \varepsilon - P \frac{\partial u_n}{\partial x_n} - G_2 + \sigma_{ikM} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (7)$$

здесь q_n – молекулярный тепловой поток;

$$G_2 = a_k \frac{\partial P}{\partial x_k}; \quad a_i \equiv \frac{\overline{\rho' u'_i}}{\bar{\rho}} = -\frac{c_\alpha D}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial s} \right)_P \frac{\partial \bar{s}}{\partial x_k};$$

$$Q_n^T = -c_\alpha \rho D \left(\frac{\partial e}{\partial s} \right)_P \frac{\partial s}{\partial x_k}.$$

Для идеального газа с постоянной адиабаты γ уравнение (7) можно записать

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_n}(\rho u_n e - \gamma P a_n + q_n) = \\ = -P \frac{\partial u_n}{\partial x_n} + \rho \varepsilon - G_2 + \sigma_{ikM} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (8)$$

причем

$$a_k = c_e D \left(\frac{1}{\gamma P} \frac{\partial P}{\partial x_k} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \right).$$

Уравнение для массовых долей компонентов

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha^{(i)} \rho) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha^{(i)} \rho u_k) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho \left(c_\alpha D \left(\frac{\partial \alpha^{(i)}}{\partial s} \right) \right)_P \frac{\partial s}{\partial x_k} + \xi^{(i)} \frac{\partial \alpha^{(i)}}{\partial x_k} \right) + \rho R^{(i)}, \end{aligned}$$

$\xi^{(i)} = \xi^{(i)}(\rho, T, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)})$ – кинематический коэффициент молекулярной диффузии i -го компонента смеси; $R_i(\rho, T, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)})$ – скорость изменения массовой доли данного компонента вследствие химической реакции.

Уравнение состояния в случае смеси идеальных газов

$$P = \frac{RT\rho}{\mu}; \quad \mu \equiv \sum_{i=1}^{i=N} \frac{\alpha_i}{\mu_i}. \quad (9)$$

Дифференциальные уравнения для турбулентных величин имеют следующий вид:

уравнение для турбулентной энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho k u_k) = \\ = (G_1 + G_2) - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho c_k D \frac{\partial k}{\partial x_k} \right); \end{aligned} \quad (10)$$

для скорости диссипации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho \varepsilon u_k) = \\ = \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} G_1 + c_{\varepsilon 2} G_2 - c_{\varepsilon 3} \rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho c_\varepsilon D \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

здесь сдвиговое порождение турбулентности

$$G_1 = \sigma_{jkT} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}. \quad (12)$$

Система уравнений (1)–(12) содержит феноменологические коэффициенты: $c_e, c_k, c_\alpha, c_D, c_\varepsilon, c_{\varepsilon 1}, c_{\varepsilon 2}, c_{\varepsilon 3}$. Их значения приведены в табл. 1.

Таблица 1

Значение коэффициентов для модели турбулентности

c_e	c_k	c_α	c_D	c_ε	$c_{\varepsilon 1}$	$c_{\varepsilon 2}$	$c_{\varepsilon 3}$
3	3	3	0,12	2	1,3	1	2

2. Гравитационное перемешивание плоского слоя раздела

Рассмотрим два полупространства (разделенных в начальный момент плоскостью $z = z_c = 0$), заполненных покоящимися несжимаемыми жидкостями (газами) с плотностями $\rho_1 = 1$ и $\rho_2 = n$. Ускорение тяжести $g_z = -1 \equiv -g$ направлено от тяжелого вещества к легкому.

В принятой системе отсчета граница раздела покоится. Рассмотрим автомодельную стадию задачи о гравитационном турбулентном перемешивании описанного выше слоя раздела и приближенное решение данной задачи. Учтем стандартное при выводе k - ε модели предположение, имеющее вид

$$u_z = \tilde{u}_z \equiv \langle u_z \rangle + \langle u'_z \rho' \rangle / \langle \rho \rangle = \langle u'_z \rho' \rangle / \langle \rho \rangle = -c_\alpha \frac{D}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}. \quad (13)$$

В данной задаче среднее по ансамблю $\langle u_z \rangle = 0$, а в модели фигурируют средние по Фавру $u_z = \tilde{u}_z$.

Из уравнения неразрывности (1) следует

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(c_\alpha D \frac{\partial \rho}{\partial z} \right). \quad (14)$$

Вводим автомодельную переменную

$$\chi = \frac{z - z_c}{Agt^2}, \quad (15)$$

где $A \equiv \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}$ – число Атвуда. Полагая

$$\varphi(\eta) \equiv \frac{\rho}{\rho_1}; \quad (16)$$

$$D \equiv d(\eta)g^2t^3;$$

$$k \equiv E(\eta)g^2t^2, \quad (17)$$

из уравнения (14) для автомодельного режима получим

$$2\chi\varphi' + \frac{c_\alpha}{A^2}(d\varphi)' = 0. \quad (18)$$

Обозначим

$$Z \equiv \frac{\varphi'}{\varphi}. \quad (19)$$

Примем основное приближение данной задачи

$$Z \approx \text{const},$$

тогда из выражения (18) следует

$$2\chi + \frac{c_\alpha}{A^2}(d' + dZ) = 0, \quad (20)$$

решение которого

$$d = \frac{2A^2}{c_\alpha Z} \left[\left(\chi_1 - \frac{1}{Z} \right) e^{Z(\chi_1 - \chi)} + \frac{1}{Z} - \chi \right]. \quad (21)$$

Уравнения (10), (11) для турбулентной энергии и ее диссипации примут вид

$$2E - \left(2\chi + \frac{c_\alpha dZ}{A^2} \right) (ZE + E') - \frac{c_\alpha (dZ)' E}{A^2} = \frac{c_\alpha dZ}{A} - c_D \frac{E^2}{d} + \frac{c_k}{A^2} \left[dE'Z + (dE')' \right]; \quad (22)$$

$$\frac{E^2}{d} - \left(2\chi + \frac{c_\alpha dZ}{A^2} \right) \left(\frac{ZE^2}{d} + \left(\frac{E^2}{d} \right)' \right) - \frac{c_\alpha E^2}{A^2 d} (dZ)' = \frac{E}{d} \left(\frac{c_{\varepsilon_2} c_\alpha dZ}{A} - \frac{c_{\varepsilon_3} c_D E^2}{d} \right) + \frac{c_\varepsilon}{A^2} \left[\left(d \left(\frac{E^2}{d} \right)' \right)' + Zd \left(\frac{E^2}{d} \right)' \right]. \quad (23)$$

Положим

$$\frac{d}{E} = K = \text{const}. \quad (24)$$

Используя формулу (21), перепишем уравнения (22), (23):

$$2d - \left(2\chi + \frac{c_\alpha dZ}{A^2} \right) (Zd + d') - \frac{c_\alpha d (dZ)'}{A^2} = \frac{c_\alpha dZK}{A} - c_D \frac{d}{K} + \frac{c_k}{A^2} \left[dd'Z + (dd')' \right];$$

$$d - \left(2\chi + \frac{c_\alpha dZ}{A^2} \right) (Zd + d') - \frac{c_\alpha d (dZ)'}{A^2} = d \left(\frac{c_{\varepsilon_2} c_\alpha ZK}{A} - \frac{c_{\varepsilon_3} c_D}{K} \right) + \frac{c_\varepsilon}{A^2} \left[(dd')' + Zdd' \right]. \quad (25)$$

Вычтем из первого уравнения (25) второе, получим

$$d = \frac{c_\alpha dZK}{A} (1 - c_{\varepsilon_2}) + \frac{c_D d}{K} (c_{\varepsilon_3} - 1) + \left(\frac{c_k - c_\varepsilon}{A^2} \right) \left[dd'Z + (dd')' \right]. \quad (26)$$

Приравнявая $c_{\varepsilon_2} = 1$, обращаем в нуль первое слагаемое в правой части. При этом, однако, на границе ЗТП уравнение (26) справедливо лишь при $c_k = c_\varepsilon$. Тогда, рассматривая (26) с учетом (20) при $\chi = \chi_m$, таком, что $d'(\chi_m) = 0$, получаем выражение

$$K = c_D (c_{\varepsilon_3} - 1). \quad (27)$$

Из первого уравнения (25) при $\chi = \chi_m$ имеем

$$Z = \frac{\left(2 + \frac{c_D}{K} + \frac{2c_k}{c_\alpha} \right) A}{c_\alpha K}. \quad (28)$$

Из граничных условий для φ и определения (19) для Z очевидно следует

$$\int_{\chi_1}^{\chi_2} Zd\chi \approx Z(\chi_2 - \chi_1) = \ln(n). \quad (29)$$

Таким образом, отсюда и из определения (16) следует выражение для приведенной ширины ЗТП

$$\alpha_y \equiv \frac{L}{Agt^2} = \chi_2 - \chi_1 = \frac{\ln(n)}{Z}, \quad (30)$$

которую можно найти с помощью формул (27), (28).

Подставим в уравнение (21) граничное условие: $d(\chi_2) = 0$, с учетом (29) это дает

$$\chi_1 = \frac{n-1-n \ln(n)}{Z(n-1)}; \quad \chi_2 = \frac{n-1-\ln(n)}{Z(n-1)}.$$

$$\tilde{k}_{\max} \equiv \frac{k_{\max}}{Lg} = -\frac{2A\chi_m}{c_\alpha K \ln(n)}. \quad (31)$$

Отсюда и из формулы (21) легко найти максимальное значение d

$$d_{\max} \equiv d(\chi_m) = -\frac{2A^2\chi_m}{c_\alpha Z},$$

где

$$\chi_m = \frac{\ln[(1-Z\chi_1)e^{Z\chi_1}]}{Z}.$$

Тогда с учетом выражений (17),(24) можно найти значение приведенной турбулентной энергии

С помощью приближенного решения удобно подбирать эмпирические коэффициенты, входящие в k -ε модель, для получения основных характеристик данного течения, наиболее близких к соответствующим данным 3D расчетов. Выход на автомодельный режим решения, полученного по методике ЭГАК на лагранжевой счетной сетке, показан (на примере варианта 1 табл. 2) на рис. 1.

Результаты расчетов как по методике ЭГАК, так и с помощью полученного выше приближенного решения приведены в табл. 2.

Таблица 2

Значения коэффициентов и результатов для вариантов расчета в задаче о гравитационном перемешивании плоского слоя раздела ($c_D = 0,121$, $c_{\varepsilon 2} = 1$)

Номер варианта	c_ε	c_k	c_α	$c_{\varepsilon 3}$	α_γ		\tilde{k}_m	
					ЭГАК	Приближенное решение	ЭГАК	Приближенное решение
1	2	3	3	2	0,165	0,158	0,06	0,054
2	2	3	3	1,5	0,070	0,066	0,0515	0,045
3	2	2	2	2	0,010	0,105	0,071	0,054
4	2	1,3	1,3	2	0,08	0,0686	0,0825	0,054
5	4/3	4/3	1,7	1,7	0,06	0,063	0,076	0,054
Опыты [5]	–	–	–	–	0,13±0,015		–	
Опыты [6]	–	–	–	–	0,16–0,17		–	
3D расчеты [10]	–	–	–	–	0,06		0,025–0,03 ($\tilde{k}_m \approx 0,047 \div 0,056$)	
3D расчеты [11]	–	–	–	–	0,06		–	

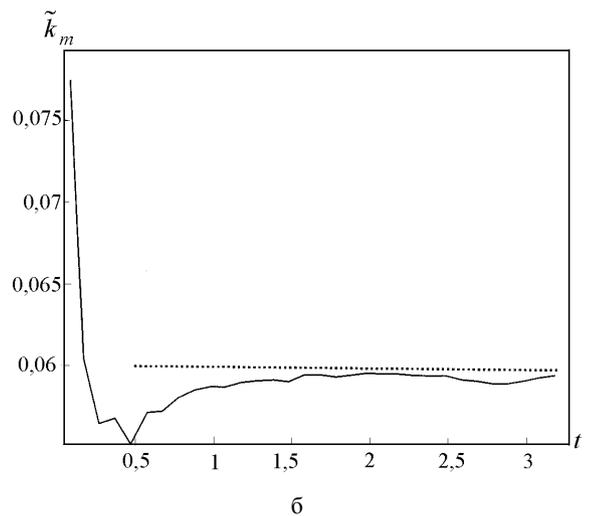
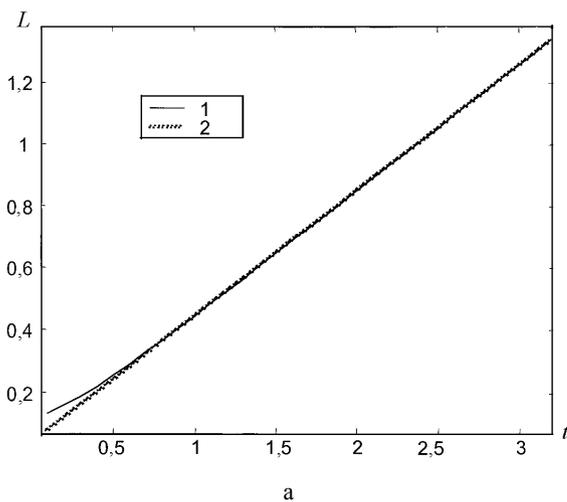


Рис. 1. Зависимость от времени ширины ЗТП (а) и максимальной по ширине ЗТП приведенной турбулентной энергии (б) в задаче о гравитационном перемешивании плоского слоя раздела: 1 – расчет; 2 – аппроксимация

Как видно из табл. 2, в расчетах с различными коэффициентами по этой методике приведенная ширина α_y ЗТП в целом близка к полученной с помощью приближенного решения (30). Максимальные значения приведенной турбулентной энергии в расчете по методике ЭГАК в целом также согласуются с приближенным решением (31).

Из табл. 2 также следует, что измерения [5, 6] близки к варианту 1 расчета с прежними значениями коэффициентов. Однако, как уже отмечалось во введении, данные, приведенные авторами [5, 6], существенно завышены из-за начального неавтомодельного участка зависимости ширины ЗТП от времени.

В то же время варианты 2, 4, 5 расчетов по методике ЭГАК близки к результатам прямого 3D численного моделирования [10], полученным на счетной сетке $200^2 \times 400$, вариант 5 с этими результатами практически совпадает. В свою очередь, указанные результаты практически совпадают с данными [11], полученными на сетке $256^2 \times 512$.

Максимальные значения приведенной турбулентной энергии в расчете по методике ЭГАК в 2–3 раза превышают соответствующие данные 3D расчетов. Заметим, однако, что в последних наблюдается сильная анизотропия пульсаций скорости: отношение квадрата поперечной компоненты скорости к квадрату

продольной $a_u \equiv \frac{\langle (u'_x)^2 \rangle}{\langle (u'_z)^2 \rangle} \approx 0,3$. Поскольку турбу-

лентный перенос всех величин в рассматриваемом течении осуществляется именно продольной компонентой, то для сопоставления с изотропной k - ε моделью логично сравнивать величину $\tilde{k}_m = \frac{3}{2} \langle (u'_z)^2 \rangle$.

Так как $\tilde{k}_m = \frac{\langle (u'_z)^2 \rangle + 2 \langle (u'_x)^2 \rangle}{2}$, то $\tilde{k}_m = \frac{3}{2a_u + 1} \tilde{k}_m$.

Эта величина, также показанная в табл. 2, оказывается гораздо ближе к результатам расчетов вариантов 2, 4, 5 по методике ЭГАК: в наиболее интересующем нас варианте 5 турбулентная энергия на треть больше величины \tilde{k}_m из 3D расчета.

3. Гравитационное перемешивание легкого (тяжелого) плоского слоя

Легкий плоский слой с плотностью ρ_1 и толщиной d , окруженный жидкостью с плотностью ρ_0 , находится в поле тяжести с ускорением g . В данной задаче, как и в предыдущем пункте, справедливы соотношения (13)–(15).

Автомодельное решение устанавливается при $L/d \rightarrow \infty$, ищем его в виде

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - \frac{d\varphi(\eta)}{L(t)} \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right); \quad \eta \equiv \frac{z - z_d}{L}; \quad (32)$$

$$D = L(t)\delta(\eta)B; \quad (33)$$

$$B \equiv \sqrt{dg \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right)}.$$

Подставим выражения (32), (33) в (14), второй член слева при этом оказывается более высокого порядка малости по d/L , остающиеся члены дают уравнение

$$\varphi + \eta\varphi' + \lambda(\delta\varphi)' = 0, \quad (34)$$

где

$$\lambda \equiv \frac{c_\alpha B}{L}.$$

В силу условия автомодельности $\lambda = \text{const}$ имеем

$$L \equiv t \frac{c_\alpha}{\lambda} \sqrt{dg \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right)}.$$

Из уравнения (34) следует (с учетом обращения в ноль величин вне слоя)

$$\eta\varphi + \lambda\delta\varphi' = 0. \quad (35)$$

Сохранение массы приводит, очевидно, к соотношению

$$\int_0^1 \varphi d\eta = 1. \quad (36)$$

Уравнения (10), (11) для турбулентной энергии k и скорости диссипации ε в данной задаче

$$\frac{dk}{dt} = G_2 - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial z} \left(c_k D \frac{\partial k}{\partial z} \right); \quad (37)$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 2} G_2 - c_{\varepsilon 3} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial z} \left(c_\varepsilon D \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right), \quad (38)$$

где

$$G_2 = -c_\alpha D \frac{g_z}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}.$$

Автомодельное решение ищем в виде

$$\varepsilon = \frac{E(\eta)}{L(t)}; \quad k = k(\eta),$$

тогда выражения (37), (38) можно записать

$$\eta k' B \frac{c_\alpha}{\lambda} - A \delta\varphi' - E + c_k B (\delta k')' = 0; \quad (39)$$

$$(E + \eta E') \frac{c_\alpha B}{\lambda} + \frac{E}{k} (-c_{\varepsilon 2} A \delta\varphi' - c_{\varepsilon 3} E) + c_\varepsilon B (\delta E')' = 0. \quad (40)$$

Здесь

$$A \equiv c_\alpha \left(dg \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right) \right)^{3/2} \equiv c_\alpha B^3.$$

Примем

$$E = Kk.$$

подставим это соотношение в (40) и вычтем из (39), полагая также $c_\varepsilon = c_k$, и $c_{\varepsilon 2} = 1$. Получим

$$\lambda = \frac{c_\alpha B}{(c_{\varepsilon 3} - 1)K}.$$

Далее используем основное приближение: $\varphi' = \text{const}$. Тогда из выражений (35), (36) следует ($1 \geq \eta \geq 0$)

$$\varphi = 2(1-\eta); \quad \delta = \frac{\eta(1-\eta)}{\lambda}.$$

Подставим эти выражения в (39) и проинтегрируем от 0 до 1. Учитывая, что

$$k = \frac{KB\eta(1-\eta)}{\lambda c_D}; \quad \int_0^1 k d\eta = \frac{BK}{6\lambda c_D}, \quad (41)$$

получим

$$K^2 = 2c_\alpha c_D B^2; \quad (42)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{c_\alpha}{2c_D}} \frac{1}{(c_{\varepsilon 3} - 1)}. \quad (43)$$

Из (41)–(43) следует выражение для максимально-го безразмерного значения турбулентной энергии

$$\tilde{k}_m \equiv \frac{k_m}{dg \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right)} = \frac{c_{\varepsilon 3} - 1}{2}.$$

Величину b определим согласно [26]: $b \equiv \frac{d\tilde{L}}{dt}$; $\tilde{L} \equiv \frac{L}{\sqrt{dg(1-\rho_1/\rho_0)}} \equiv \frac{L}{B}$, тогда для b из (37), (43) следует выражение

$$b = \frac{c_\alpha}{\lambda} = (c_{\varepsilon 3} - 1)\sqrt{2c_D c_\alpha}. \quad (44)$$

С помощью приближенного решения, таким образом, можно подбирать входящие в него эмпирические коэффициенты k - ε модели для получения основных характеристик данного течения, наиболее близких к измеренным.

Выход на автомодельный режим решения, полученного по методике ЭГАК на эйлеровой счетной сетке, показан (на примере варианта 1 табл. 3) на рис. 2.

Как видно из табл. 3, в расчетах с различными коэффициентами по этой методике приведенная ширина b в целом близка к полученной с помощью приближенного решения (44). Максимальные значения приведенной турбулентной энергии в расчете по методике ЭГАК в целом хуже согласуются с приближенным решением.

Таблица 3

Значения коэффициентов и результатов для вариантов расчета в задаче о перемешивании легкого слоя ($c_D = 0,121$; $c_{\varepsilon 2} = 1,0$)

Номер варианта	c_α	c_k	c_ε	$c_{\varepsilon 3}$	b		\tilde{k}_m	
					ЭГАК	Приближенное решение	ЭГАК	Приближенное решение
1	3	3	2	2	0,715	0,85	0,237	0,5
2	3	3	2	1,5	0,43	0,424	0,174	0,25
3	3	4/3	4/3	1,7	0,43	0,594	0,267	0,35
4	1,7	4/3	4/3	1,7	0,36	0,447	0,233	0,35
Опыты [26]	–	–	–	–	0,35±0,37		–	

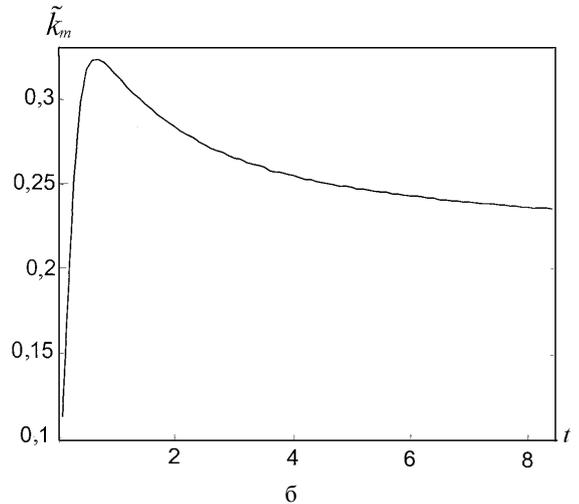
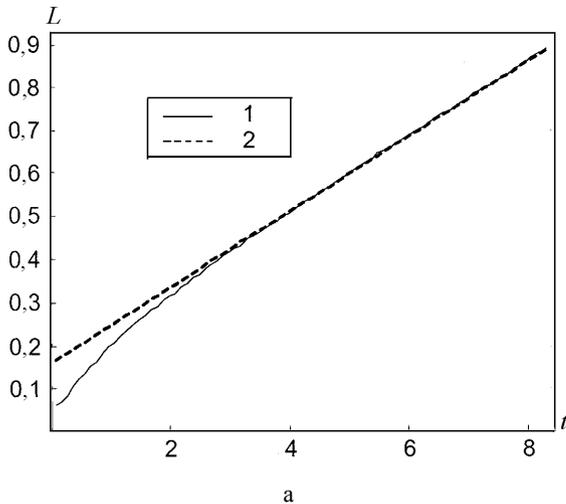


Рис. 2. Зависимость от времени ширины ЗТП (а) и максимальной по ширине ЗТП приведенной турбулентной энергии (б) в задаче о легком слое смешения: 1 – расчет; 2 – аппроксимация

Из табл. 3 следует, что измерения [26] ближе к варианту 4 с новыми значениями $c_\alpha = c_{\varepsilon 3} = 1,7$.

3D расчеты данной задачи были выполнены на довольно грубой счетной сетке (наиболее подробная сетка 96^3), поэтому можно лишь отметить, что максимальные значения приведенной турбулентной энергии изменяются почти на порядок в разных вариантах $\tilde{k}_m = 0,13 \div 1,1$. По-видимому, получить автомодельный режим в 3D расчетах данной задачи сложнее, чем в задаче о перемешивании двух полупространств, поскольку максимальная разнородность $\delta\rho_m$ уменьшается со временем: $\delta\rho_m \sim 1/t$, что создает трудности при численном счете.

4. Сдвиговое перемешивание плоского слоя раздела

Рассматриваемая модель с достаточной точностью оказывается применимой и для описания автомодельного сдвигового течения. Например, возникающего в начальном участке слоя смешения, создаваемого на краю струи, вытекающей из сопла, когда отношение скорости струи (относительно сопла) к скорости самого сопла относительно окружающей среды близко к единице, а задача однородна по плотности. Тогда в системе отсчета, связанной со средой, задача становится одномерной, но нестационарной – в автомодельном режиме ширина плоского слоя смешения растет линейно со временем пропорционально разности скоростей u_0 между скоростью струи и окружающей среды.

Введем автомодельные переменные

$$u_x \equiv \frac{dx}{dt} = u_0 f(\chi)/2; \quad k = u_0^2 E(\chi); \quad D = u_0^2 t d(\chi);$$

$$\chi \equiv \frac{y}{u_0 t}.$$

Граничное условие для касательной скорости u_x , изменяющейся только по координате y :

$$u_x = \begin{cases} u_0/2; & y > y_2; \\ -u_0/2; & y < y_1 = -y_2. \end{cases} \quad (45)$$

Уравнения (2), (4) для автомодельного режима запишем, полагая $v \equiv f'$:

$$\chi v + (dv)' = 0. \quad (46)$$

Для получения приближенного решения рассмотрим уравнения (10), (11) в центральной части ЗТП (т. е. при $\chi = 0$), где первые производные от k , ε , D обращаются в ноль, тогда выражение (10) с учетом (6) запишем для автомодельного режима в виде

$$dv^2/4 - c_D E^2/d + c_k (dE')' = 0. \quad (47)$$

Примем также приближения

$$K \equiv E/d \approx \text{const}; \quad (48)$$

$$v \approx \text{const}. \quad (49)$$

Тогда из формулы (46) следует

$$d = (\chi_1^2 - \chi^2)/2, \quad (50)$$

а из формулы (47) следует $E'' = -K = (c_D K^2 - v^2/4)/c_k$, т. е.

$$v = 2\sqrt{K(c_D K + c_k)}. \quad (51)$$

Уравнение (11), записанное для автомодельного режима, с учетом (48)–(51) дает

$$K = \frac{1 - c_\varepsilon + c_{\varepsilon 1} c_k}{c_D (c_{\varepsilon 3} - c_{\varepsilon 1})}. \quad (52)$$

Учитывая, что $f(\chi_2) = 1$; $f(\chi_1) = -1$, а ширина зоны перемешивания $L = y_2 - y_1$ (см. (45)), получим

$$v = \frac{df}{d\chi} \approx \frac{2A}{\chi_2 - \chi_1} = \frac{A}{|\chi_1|}; \quad (53)$$

$$\hat{L} \equiv \frac{1}{u_0} \frac{dL}{dt} = \chi_2 - \chi_1 = \frac{2A}{v} = \frac{A}{\sqrt{K(c_D K + c_k)}}, \quad (54)$$

где поправочный коэффициент $A > 1$ учитывает, что значение величины $v = \frac{df}{d\chi} \approx \frac{2A}{\chi_2 - \chi_1}$ в центре ЗТП, которое фигурирует в нашем рассмотрении, превышает среднее по ЗТП значение этой величины $\langle v \rangle = \langle \frac{df}{d\chi} \rangle = \frac{2}{\chi_2 - \chi_1}$.

Из выражений (48), (50) очевидно следует, что максимальное значение $E_m = K\chi_1^2/2$, что позволяет найти максимальное значение приведенной величины турбулентной энергии с помощью (53)

$$E_m = \frac{KA^2}{2v^2} = \frac{A^2}{8(c_D K + c_k)}. \quad (55)$$

Выход на автомодельный режим решения, полученного по методике ЭГАК, показан (на примере варианта 1 табл. 4) на рис. 3.

Значения коэффициентов и результатов для вариантов расчета в задаче о сдвиговом перемешивании ($c_D = 0,121$; $c_{\varepsilon 2} = 1,0$)

Номер варианта	$c_{\varepsilon 1}$	c_{ε}	c_k	$c_{\varepsilon 3}$	\hat{L}		E_m	
					ЭГАК	Приближенное решение	ЭГАК	Приближенное решение
1	1,3	2	3	2	0,0965	0,083	0,031	0,0296
2	1	2	3	1,5	0,087	0,085	0,0288	0,0302
3	1	4/3	4/3	1,7	0,12	0,227	0,048	0,076
4	1,1	4/3	4/3	1,7	0,098	0,183	0,0408	0,066
5	1,15	4/3	4/3	1,7	0,086	0,163	0,0375	0,06
6	1,2	1	3	1,7	0,066	0,525	0,0227	0,0207
7	1,3	2	3	1,5	0,0264	0,0283	0,0115	0,0121
8	1,15	2	3	1,5	0,0533	0,0538	0,0205	0,0211
9	0,8	2,3	3	1,7	0,19	0,198	0,051	0,05
10	0,8	4/3	4/3	1,7	0,2	0,34	0,067	0,098
11	2	2	3	1,5	$\rightarrow 0$	< 0	$\rightarrow 0$	< 0
Опыты [17]	–				0,074–0,083		0,025–0,043	
3D расчет [4]	Число ячеек 300×300×400				0,08–0,09		0,034	

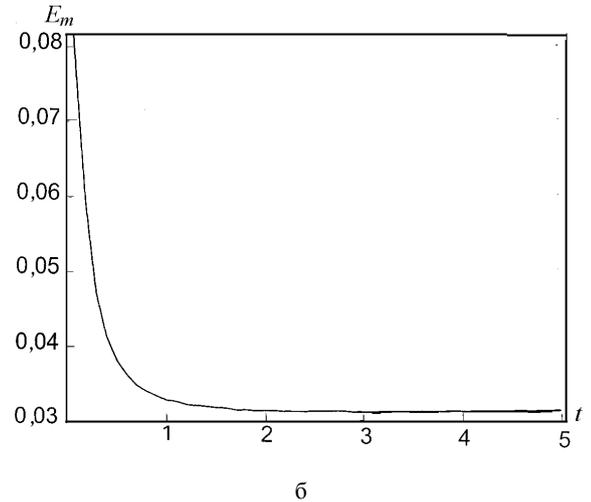
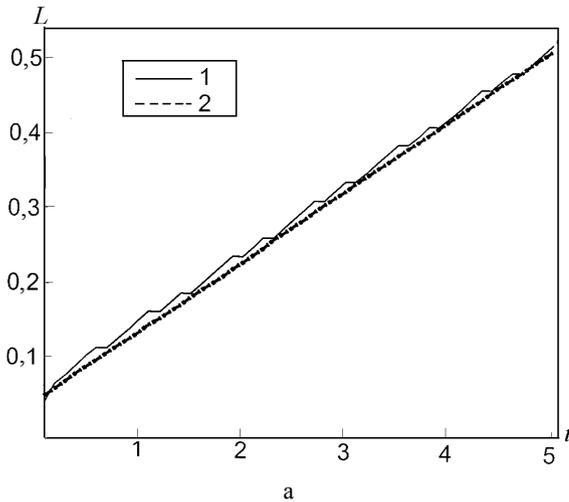


Рис. 3. Зависимость от времени ширины ЗТП (а) и максимальной по ширине ЗТП приведенной турбулентной энергии (б) в задаче о сдвиговом слое смешения: 1 – расчет; 2 – аппроксимация

Как видно из табл. 4, приведенная ширина ЗТП в расчетах с различными коэффициентами по этой методике в целом близка к полученной с помощью приближенного решения (54), (51), (52) (используется значение $A = 1,3$) во всех случаях, кроме вариантов с $c_{\varepsilon} = c_k = 4/3$. Максимальные значения приведенной турбулентной энергии в расчете по методике ЭГАК в целом также согласуются с приближенным решением (55), кроме вариантов с $c_{\varepsilon} = c_k = 4/3$.

Отметим, что набор коэффициентов в варианте 11 приводит к полному подавлению турбулентности, чему

формально соответствуют отрицательные значения \hat{L} и E_m в приближенном решении.

Из табл. 4 следует, что измерения \hat{L} в [17] наиболее близки к результатам вариантов 2 и 5 (ближе к варианту 5). Измеренные значения E_m в [17] наиболее близки к результатам вариантов 1, 2 и 4, 5 (варианты 3, 6 также мало отличаются от измерений). Заметим, что максимальное и минимальное из фигурирующих в табл. 4 значений турбулентной энергии в эксперименте

[17] получено соответственно из соотношений $k_{\max} = 3u_{\text{long}}^2/2$; $k_{\min} = 3u_{\text{lat}}^2/2$, где u_{long} – среднеквадратичная пульсация продольной компоненты скорости, u_{lat} – поперечной.

Как видно из табл. 4, данные 3D расчета [14] также близки к результатам вариантов 1, 4 и 5.

Результаты расчетов по данной методике приведены на рис. 4, на котором показана величина, обратная скорости нарастания толщины слоя смешения

$$\sigma = \frac{1,855\Delta x}{\Delta(y_{0,1} - y_{0,9})},$$

где $\Delta(y_{0,1} - y_{0,9})$ – расстояние между точками, в которых относительная скорость $\tilde{u} = \frac{u - u_2}{u_1 - u_2}$ принимает соответственно значения 0,1 и 0,9.

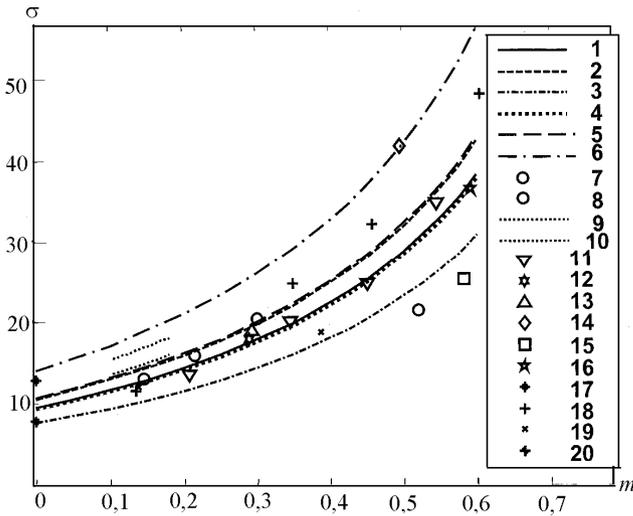


Рис. 4. Зависимость σ от времени в задаче о сдвиговом слое смешения: расчет: 1–6 соответствуют вариантам 1–6 табл. 4; 7, 8 – измерениям [17]; 9–18 – экспериментальным данным [16]

Для результатов расчетов, как и в [12], длине струи $(x - x_0)$, фигурирующей в опытах, сопоставляется время $(t - t_0)$

$$(x - x_0) = \frac{(u_1 + u_2)}{2}(t - t_0).$$

Поскольку $\Delta y = (u_2 - u_1)(\chi_2 - \chi_1)t$, то

$$\sigma = \frac{1,855(1 + m)}{4(1 - m)|\chi_1|},$$

где $m \equiv \frac{u_1}{u_2}$, а скорости относятся к системе отсчета, связанной с разделительной пластиной или соплом. Аналогичным образом на рис. 4 представлены данные измерений [17] для соответствующего интервала изме-

рений $\lambda \equiv \frac{1 - m}{1 + m} = 0,695 \div 0,82$. Напомним, что именно случай $\lambda \approx 1$ ($m \approx 0$) наиболее соответствует рассматриваемой задаче.

Различными точками на рис. 4 показаны также экспериментальные данные разных авторов, приведенные в [16]. Как видно, расчетные кривые в вариантах 1–6 согласуются с измерениями, в то время как данные остальных вариантов явно выше или ниже экспериментальных точек (на рис. 4 они не приведены) – наилучшее согласие в целом с опытами наблюдается для вариантов 1, 4, 5.

Таким образом, при прежних значениях эмпирических коэффициентов имеется достаточное согласие с опытами в пределах их погрешностей. Чтобы обеспечить подобное согласие для значения $c_{\varepsilon 3} = 1,7$, требуется принять $c_{\varepsilon 1} \approx 1,15$, $c_{\varepsilon} = c_k = 4/3$.

5. Нейтрально стратифицированный турбулентный пограничный слой

В данной задаче $G_2 = 0$, $\Lambda \sim k^{3/2}/\varepsilon \sim y$ (y – расстояние от жесткой стенки), а характерный временной масштаб $\tau \sim \Lambda/u_* \sim y$, где динамическая скорость

$u_*^2 \equiv D \frac{\partial u_x}{\partial y} = \text{const}$, и для определенности мы положи-

ли $\frac{\partial u_x}{\partial y} > 0$, $\rho = 1$. Это означает, что вблизи стенки τ мало, т. е. устанавливается стационарное турбулентное течение. Уравнение (2) для этого случая дает $\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0$ или, учитывая (4)

$$\sigma_{xy} = -D \frac{\partial u_x}{\partial y} \equiv -u_*^2 = \text{const},$$

что согласуется с ранее принятым предположением.

При этом $\frac{\partial u_x}{\partial y} \sim \frac{u_*}{y}$, а значит $D \sim y$. Но $D \sim \Lambda \sqrt{k}$, а значит вблизи стенки $k = \text{const}$. Тогда из (10), (12) следует

$$G_1 = D \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)^2 = \varepsilon. \quad (56)$$

Уравнение (11) можно записать

$$\frac{\varepsilon^2}{k} (c_{\varepsilon 1} - c_{\varepsilon 3}) + c_{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) = 0. \quad (57)$$

Учитывая же (6), (56) имеем

$$\frac{\varepsilon}{k} = \sqrt{c_D} \frac{\partial u_x}{\partial y}.$$

Следовательно, выражение (57) можно записать

$$C_f f^2 = \frac{\partial^2 \ln f}{\partial y^2}. \quad (58)$$

Здесь $f \equiv \frac{\partial u_x}{\partial y}$; $C_f \equiv \left(\frac{\kappa_K}{u_*}\right)^2$; $\kappa_K \equiv c_D^{1/4} \sqrt{\frac{(c_{\varepsilon 3} - c_{\varepsilon 1})}{c_\varepsilon}}$.

Решение уравнения (58) имеет вид

$$u = \frac{u_*}{\kappa_K} \ln\left(\frac{y}{h_0}\right), \quad (59)$$

где h_0 – высота шероховатости либо толщина ламинарного подслоя. Из формулы (59) видно, что κ_K – постоянная Кармана. Ее значение для различных наборов эмпирических коэффициентов, фигурирующих в данном отчете, приведено в табл. 5.

Таблица 5

Значения постоянной Кармана для различных значений эмпирических коэффициентов ($c_D = 0,121$)

Номер варианта	$c_{\varepsilon 1}$	c_ε	$c_{\varepsilon 3}$	κ_K
1	1,3	2	2	0,348
2	1,3	2	1,5	0,186
3	1	2	1,5	0,186
4	1,15	2	1,5	0,246
5	1,2	2	1,7	0,294
6	0,8	2,3	1,7	0,368
7	1,2	1	1,7	0,416
7a	1,15	1	1,7	0,436
8	1	4/3	5/3	0,416
9	0,8	4/3	1,7	0,483
10	1	4/3	1,7	0,426
11	1,1	4/3	1,7	0,395
12	1,15	4/3	1,7	0,378

Согласно экспериментальным данным [27] $\kappa_K = 0,4 \pm 0,04$. Как видно из табл. 5, вариант 1 (т. е., прежние значения эмпирических коэффициентов) можно считать удовлетворительно согласующимся с этими данными, в то время как вариант 12 согласуется с ними заметно лучше.

6. Затухание однородной изотропной турбулентности

Из уравнений (10), (11) для данной задачи следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} &= -\varepsilon; \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} &= -c_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon^2}{k}. \end{aligned} \quad (60)$$

Отсюда

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \left(\frac{k}{k_0}\right)^{c_{\varepsilon 3}}. \quad (61)$$

Из выражений (60) и (61) получаем

$$\frac{k}{k_0} = \left(\frac{t}{t_0}\right)^{-m}; \quad t_0 \equiv \frac{mk_0}{\varepsilon_0}. \quad (62)$$

Здесь $m = \frac{1}{c_{\varepsilon 3} - 1}$.

Для пространственного масштаба турбулентности $\Lambda = k^{3/2}/\varepsilon$ с учетом (62) имеем

$$\frac{\Lambda}{\Lambda_0} = \left(\frac{t}{t_0}\right)^\delta; \quad \delta = 1 - \frac{m}{2}; \quad \Lambda_0 \equiv \frac{k_0^{3/2}}{\varepsilon_0}.$$

Закон затухания однородной изотропной турбулентности $m = 10/7$, $\delta = 2/7$, следующий из теоретических соображений [29], подтверждается опытами (см., например, [28]). Для используемых в данном отчете величин $c_{\varepsilon 3}$ соответствующие значения m и δ приведены в табл. 6. Как видно, эти значения для коэффициента $c_{\varepsilon 3} = 1,7$ согласуются с данными [28, 29], в то время как значения $m = 1$, $\delta = 0,5$ для прежнего коэффициента $c_{\varepsilon 3} = 2$ существенно отличаются от них.

Таблица 6

Значения показателей m и δ затухания однородной изотропной турбулентности для различных значений коэффициента $c_{\varepsilon 3}$

$c_{\varepsilon 3}$	m	δ
2	1	0,5
1,7	10/7	2/7
1,5	2	0

Заключение

Ранее, в работах [23–25] были приняты следующие значения эмпирических коэффициентов для k - ε модели турбулентности:

$c_\varepsilon = 2$; $c_{\varepsilon 1} = 1,3$; $c_{\varepsilon 2} = 0,9 \div 1$; $c_{\varepsilon 3} = 2$; $c_D = 0,12$; $c_\alpha = c_k = c_e = 3$.

В результате сопоставления результатов, полученных в данном отчете по методике ЭГАК, с данными как прямого 3D численного моделирования, так и измерений наиболее оптимальным можно считать следующий набор эмпирических коэффициентов, входящих в k - ε модель турбулентности: $c_k = 4/3$; $c_\alpha = 1,7$; $c_D = 0,12$; $c_\varepsilon = 4/3$; $c_{\varepsilon 1} = 1,15$; $c_{\varepsilon 2} = 1$; $c_{\varepsilon 3} = 1,7$.

Вновь выбранные нами коэффициенты обеспечивают в задаче о гравитационном перемешивании плоского слоя раздел приведенную ширину α_Y ЗТП (характеризующую скорость роста ЗТП), близкую к полученной в 3D расчетах [10, 11]. Кроме того, имеется согласие и по величине турбулентной энергии при учете ее анизотропии в 3D расчетах [10, 12] и изотропии в k - ε модели.

В задаче о перемешивании легкого слоя приведенная ширина b ЗТП, измеренная в [22], ближе к варианту расчета с новыми значениями коэффициентов, нежели с прежними.

В задаче о сдвиговом перемешивании как при прежних, так и при вновь выбранных нами значениях эмпирических коэффициентов имеется достаточное согласие с опытами [23] в пределах их погрешностей и 3D расчетом [14].

Для нейтрально стратифицированного турбулентного пограничного слоя вновь выбранные нами коэффициенты дают значение постоянной Кармана $\kappa_K = 0,378$, более удовлетворительно согласующееся с экспериментальными данными ($\kappa_K = 0,4 \pm 0,04$), нежели прежние значения коэффициентов, приводящие к $\kappa_K = 0,348$.

Авторы благодарны В. А. Жмайло, Ю. В. Янилкину за полезные обсуждения.

Список литературы

1. Read K. I. Experimental investigation for turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability // *Physica*. 1984. Vol. D12. P. 45.
2. Youngs D. L. Modeling turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability // *Ibid*. 1989. Vol. D37. P. 270.
3. Youngs D. L. // *Phys. Fluids*. 1991. Vol. A3. P. 1312.
4. Linden P. F., Redondo J. M., Youngs D. L. Molecular mixing in Rayleigh-Taylor instability // *J. Fluid Mech*. 1994. Vol. 265. P. 97–124.
5. Dimonte G., Schneider M. Density ratio dependence of Rayleigh-Taylor mixing for sustained and impulsive acceleration histories // Report to 8th International Seminar on Turbulent Mixing of Compressible Matter. 8th IWPCTM, Pasadena, USA, 2001.
6. Кучеренко Ю. А., Шестаченко О. Е., Пискунов Ю. А., Свиридов Е. В., Медведев В. М., Байшев А. И. Экспериментальное исследование автомодельного режима перемешивания разнотных газов в поле тяжести Земли // VI Забалахинские научные чтения: Тез. докл. Снежинск, 24–28 сентября 2001 г.
7. Youngs D. L. Numerical simulation of mixing by Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instabilities // *Laser and Particle Beams*. 1994. Vol 12, No. 4. P. 725–750.
8. Жмайло В. А., Стадник А. Л., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Прямое численное моделирование гравитационного турбулентного перемешивания // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1996. Вып. 1–2. С. 29–37.
9. Sinkova O. G., Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Zhmailo V. A. Three-Dimensional Direct Numerical Simulation of Gravitational Turbulent Mixing // 6th Inter. Workshop on the Phys. of compr. turbulent mixing. Marseille, France. 1997. P. 470–479.
10. Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Rebrov S. V., Sin'kova O. G., Stadnik A. L. Study of gravitational turbulent mixing at large density differences using direct 3D numerical simulation // Report to 8th International Seminar on Turbulent Mixing of Compressible Matter. 8th IWPCTM, Pasadena, USA, 2001.
11. Weber S. W., Dimonte G., Marinak M. M. ALE simulations turbulent Rayleigh-Taylor instability in 2D and 3D // Report to 8th International Seminar on Turbulent Mixing of Compressible Matter: 8th IWPCTM, Pasadena, USA, 2001.
12. Бахрах С. М., Жмайло В. А., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Численное моделирование турбулентного перемешивания в сдвиговых течениях // *Числ. методы мех. спл. среды*. 1983. Т. 14, №. 2. С. 11–27.
13. Жмайло В. А., Стадник А. Л., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Прямое численное моделирование турбулентного перемешивания в сдвиговых течениях // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1996. Вып. 1–2. С. 38–47.
14. Жмайло В. А., Синькова О. Г., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Прямое трехмерное численное моделирование сдвигового турбулентного перемешивания // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2004. Вып. 3. С. 23–39.
15. Spenser B. W., Jones B. G. Statistical investigation of pressure and velocity fields in the turbulent two-stream mixing layers. -AIAA Paper, 1971. P. 613.
16. Rodi W. A. Review of experimental data of uniform density free turbulent boundary layers. -Studies in convection, Acad. Press, London, 1975. Vol 1. P. 79–166.
17. Browand F. K., Latigo B. O. Growth of the two-dimensional mixing layer // *Phys. Fluids*. 1979. Vol. 22, No. 6. P. 1011.
18. Беленький С. З., Фрадкин Е. С. Теория турбулентного перемешивания // *Тр. ФИАН СССР*. 1965. Т. 29. С. 207–238.
19. Lewellen, Teske M. E., Donaldson C. P. Variable density flows Computed by a second-order closure description of turbulence // *AIAA Journal*. 1976. Vol. 14, No. 3. P. 382–387.
20. Андронов В. А., Бахрах С. М., Мешков Е. Е., Никифоров В. В., Певницкий А. В., Толшмяков А. И. Экспериментальное исследование и численное моделирование турбулентного перемешивания в одномерных течениях // *Докл. АН СССР*. 1982. Т. 264, № 1. С. 76–82.
21. Yanilkin Yu. V., Nikiforov V. V., Bondarenko Yu. A., Gubkov E. V., Zharova G. V., Statsenko V. P., Tarasov V. I. Two-parameter model and method for computations of turbulent mixing in 2D compressible flows // 5rd International Workshop on the Physics of compressible turbulent mixing. Stony Brook, USA, 1995.
22. Стаценко В. П. Тестирование модели турбулентности с анизотропией тензора Рейнольдса // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1996. С. 43–51.
23. Eliseyev G. M., Shemyakin V. Yu., Statsenko V. P., Tarasov V. I., Yanilkin Yu. V., Zharova G. V. Turbulent combustion of hydrogen-air mixture in a closed vessel // Proceedings of the 7rd International Workshop on the Physics of compressible turbulent mixing. St.-Petersburg, Russia. 1999. P. 244–251.
24. Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Zhmailo V. A. 3D numerical simulation of turbulent mixing using k - ϵ turbulence model // Proceedings of the 7rd International Workshop on the Physics of compressible turbulent mixing. St.-Petersburg, Russia. 1999. P. 326–332.

25. Statsenko V. P., Velitchko O. M., Yanilkin Yu. V., Zharova G. V. Bouyant jet formation // Proceedings of the 7rd International Workshop on the Phisics of compressible turbulent mixing. St.-Petersburg, Russia. 1999. P. 333–338.

26. Kucherenko Yu. A., Balabin S. I., Pylaev A. P. Experimental stady of asymptotyc stage of the gravitational turbulent mixing of thin liquid layers of different densities // 4th International Workshop on The Phisics of compressible turbulent mixing. Cambridge, England, 1993.

27. Теннекес Х. Законы подобия, масштабные соотношения и спектральная динамика // Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей: Пер. с англ. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. С. 51–82.

28. Paavo Sepri. Two-point turbulent measurements downstream of a heated grid // Phys. Fluids. 1976. Vol. 19, No. 12. P. 1876.

29. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1953.

Статья поступила в редакцию 18.11.2005

КВАНТОВОПОЛЕВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОНФОРМНОЙ ГЕОМЕТРОДИНАМИКИ

М. В. Горбатенко
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Предлагается метод описания решений уравнений конформной геометродинамики в терминах биспиноров, удовлетворяющих уравнениям Дирака. Метод основан на использовании предложенного ранее алгоритма отображения тензорных величин на биспиноры. Биспинорная матрица, на которую отображаются вектор Вейля и лямбда-член, может описывать различные состояния частиц со спином 1/2 в зависимости от используемой системы проекторов и возникающей при этом симметрии калибровочных полей. В простейшем случае ситуация сводится к стандартной для квантовой электродинамики – заряженной частице со спином 1/2 во внешнем поле. Общие соотношения иллюстрируются на примере двух точных решений анзаццевого типа.

Введение

Будем исходить из предложенных в работах [1–4] уравнений конформной геометродинамики (КГД) в форме

$$R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} R = T_{\alpha\beta}, \quad (1)$$

где

$$T_{\alpha\beta} \equiv -2A_\alpha A_\beta - g_{\alpha\beta} A^2 - 2g_{\alpha\beta} A^{;\nu} + A_{\alpha;\beta} + A_{\beta;\alpha} + g_{\alpha\beta} \lambda. \quad (2)$$

Напомним, что структура уравнений (1) с правой частью (2) такова, что уравнения сохраняют свой вид при конформных преобразованиях

$$g_{\alpha\beta} \rightarrow g_{\alpha\beta} e^{2\sigma}, \quad A_\alpha \rightarrow A_\alpha - \sigma_{;\alpha}, \quad \lambda \rightarrow \lambda e^{-2\sigma}. \quad (3)$$

Если ввести тензор

$$F_{\alpha\beta} \equiv A_{\beta;\alpha} - A_{\alpha;\beta}, \quad (4)$$

то из уравнений КГД следует уравнение

$$F_{\alpha}{}^{;\nu}{}_{;\nu} = \lambda_{;\alpha} - 2\lambda A_\alpha. \quad (5)$$

Будем считать известным также развитый в работах [5–7] общий метод, позволяющий некоторую совокупность тензорных величин отобразить на биспинорные степени свободы.

Попытка отображения полей A_α, λ , фигурирующих в уравнениях (1) с тензором $T_{\alpha\beta}$ вида (2), на биспиноры по методу [5–7] была сделана в работах [8–10]. Было показано, что в КГД имеются вектор J^α и антисимметричный тензор $H^{\alpha\beta}$

$$J^\alpha \equiv \frac{1}{\lambda^{3/2}} g^{\alpha\beta} (\lambda_{;\beta} - 2A_\beta \lambda); \quad (6)$$

$$H^{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{\lambda} g^{\alpha\mu} g^{\beta\nu} (A_{\nu;\mu} - A_{\mu;\nu}), \quad (7)$$

которые безразмерны и имеют необходимые вейлевские веса для того, чтобы с помощью J^α и $H^{\alpha\beta}$ построить поляризационную матрицу плотности M . Построенная в [8–10] матрица M имела вид

$$M = J^\alpha (\tilde{\gamma}_\alpha \tilde{D}^{-1}) + H^{\mu\nu} (\tilde{S}_{\mu\nu} \tilde{D}^{-1}). \quad (8)$$

Здесь $\tilde{\gamma}_\alpha$ – произвольная, но фиксированная система вещественных дираковских матриц (ДМ), например,

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_0 &= -i\rho_2\sigma_1; \quad \tilde{\gamma}_1 = \rho_1; \quad \tilde{\gamma}_2 = \rho_2\sigma_2; \\ \tilde{\gamma}_3 &= \rho_3; \quad \tilde{\gamma}_5 \equiv \tilde{\gamma}_0\tilde{\gamma}_1\tilde{\gamma}_2\tilde{\gamma}_3 = i\rho_2\sigma_3, \end{aligned} \quad (9)$$

а \tilde{D} – матрица, удовлетворяющая условию $\tilde{D}\tilde{\gamma}_\alpha\tilde{D}^{-1} = -\tilde{\gamma}_\alpha^+$. В данной работе будем иметь дело только с вещественными ДМ, поэтому операция эрмитова сопряжения будет совпадать с операцией транспонирования. Тильда над величиной здесь и далее означает, что величина имеет матричные индексы локального типа.

Оба слагаемых в правой части (8) являются безразмерными и имеют нулевой вейлевский вес. Матрица M симметрична.

Далее процедура отображения привела к извлечению корня квадратного из матрицы M ,

$$M = ZZ^T. \quad (10)$$

Появившуюся в этом соотношении матрицу Z будем называть биспинорной. Она вещественна. Матрица Z может быть представлена в виде полярной факторизации

$$Z = HO^{-1}, \quad (11)$$

где H – симметричный множитель; O^{-1} – ортогональный (ортогональный множитель из-за удобства обозначен O^{-1} , а не O). Если M – положительно определенная матрица, т. е. все собственные значения положительны, то среди симметричных множителей в выражении (11) имеется положительно определенный множитель H , определяемый соотношениями (10), (11) однозначно. Именно такой множитель будет пониматься далее под символом H . Матрица Z является при этом неособенной, т. е. $\det Z \neq 0$.

В КГД по данным Коши на начальной пространственноподобной гиперповерхности эволюция системы определяется однозначно. Это означает, что по данным Коши однозначно определяется эволюция величин $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$, а вместе с ними матрицы M вида (8). Поскольку имеется взаимно-однозначное соответствие

$$M \leftrightarrow H, \quad (12)$$

то уравнения КГД дают, следовательно, однозначное описание и поля матрицы H .

После работ [8–10] остался не ясным вопрос о том, можно ли динамику геометрических объектов A_α, λ описывать в терминах динамики частиц со спином 1/2, т. е. реально наблюдаемых элементарных частиц. Дело в том, что знания поля матрицы H , согласно формуле (12), для этого недостаточно. Для описания динамики частиц со спином 1/2 требуется знать не матрицу H , а матрицу Z . Связано это с тем, что именно матрица Z реализует прямую сумму биспинорных представлений общей группы Лоренца, и только на основе матрицы Z может быть произведена релятивистски инвариантная классификация состояний частиц со спином 1/2.

Но как только мы вводим в рассмотрение биспинорную матрицу Z , так возникает проблема с ее динамикой. Для согласия с квантовой теорией поля (КТП) необходимо предположить, что матрица Z удовлетворяет уравнению Дирака

$$\tilde{\gamma}^\nu (\nabla_\nu Z) + mZ = 0, \quad (13)$$

где через $(\nabla_\nu Z)$ обозначена ковариантная производная

$$\nabla_\alpha Z = \partial_\alpha Z - Z\Gamma_\alpha, \quad (14)$$

в которой Γ_α – матричные связности, представляющие собой систему вещественных антисимметричных матриц,

$$\Gamma_\alpha^T = -\Gamma_\alpha; \quad \Gamma_\alpha^* = \Gamma_\alpha. \quad (15)$$

Уравнение Дирака (13) определяет биспинорную матрицу Z однозначно по начальным данным, а вместе с ней и матрицу H . В результате матрица H может быть определена двумя способами по схеме, показанной на рисунке. Знаки вопроса над горизонтальными стрелками означают вопросы: совпадают ли матрицы $M(x)$ и $H(x)$, найденные двумя указанными на схеме способами?

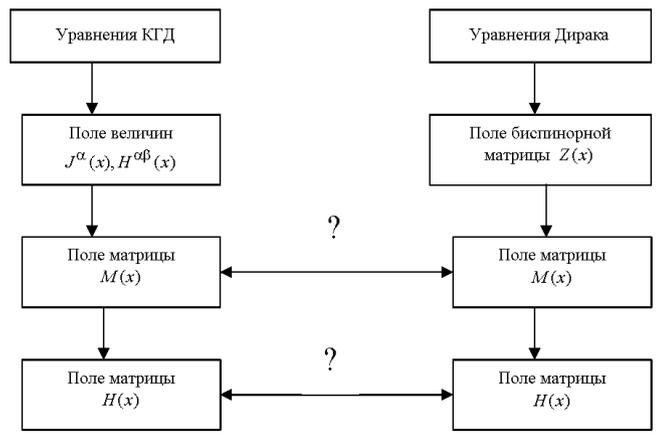


Схема нахождения матрицы H двумя способами

В данной работе доказывается, что оба способа нахождения матриц $M(x)$ и $H(x)$ приводят к одним и тем же результатам при выполнении нескольких условий. Эти условия предусматривают равенство между m и $\sqrt{\lambda}$ (в калибровке $\lambda = \text{const}$), а также выполнение некоторых ограничений на матричную связность.

Далее доказывается, что биспинорная матрица, на которую отображаются величины $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$ и которая подчиняется указанным выше уравнениям Дирака, описывает частицы со спином 1/2 в электрически заряженном состоянии (электрон, позитрон) и в нейтральном (нейтрино и антинейтрино). Результаты обсуждаются.

2. Отображение геометрических объектов КГД на биспиноры

2.1. Связи между величинами $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$, вытекающие из уравнений КГД

Соотношения (5) могут быть записаны и в терминах величин $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$, если обозначить A_α и $F_{\alpha\beta}$ через $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$, запишем соотношения (5) в частной калибровке

$$\lambda = \text{const}. \quad (16)$$

Напомним, что в этой калибровке вектор A_α удовлетворяет условию Лоренца

$$A^\sigma{}_{;\sigma} = 0, \quad (17)$$

а уравнение (5) записывается как

$$\square A_\alpha - \lambda A_\alpha = A^\nu (A_{\nu;\alpha} + A_{\alpha;\nu}). \quad (18)$$

Здесь $\square A_\alpha \equiv g^{\mu\nu} A_{\alpha;\mu;\nu}$ (при переходе от (5) к (18) использованы уравнения (1) с правой частью (2)).

Запишем теперь уравнение (18) и условие (17) в терминах J_α, λ . В калибровке (16) из соотношения (17) следует, что

$$J^\alpha{}_{;\alpha} = 0, \quad (19)$$

а соотношения (5) с учетом того, что определение (4) равносильно соотношению

$$H_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2\sqrt{\lambda}}(J_{\beta,\alpha} - J_{\alpha,\beta}), \quad (20)$$

принимают вид

$$H_{\alpha^v}{}_{;v} = \sqrt{\lambda} J_{\alpha}. \quad (21)$$

Уравнения (21) могут быть записаны в форме, аналогичной (18)

$$\square J_{\alpha} - \lambda J_{\alpha} = -\frac{\sqrt{\lambda}}{2} J^v (J_{v;\alpha} + J_{\alpha;v}). \quad (22)$$

2.2. Связи между величинами J_{α} , $H_{\alpha\beta}$, вытекающие из уравнений Дирака

Замена матрицы M в соотношении (8) по формуле (10) приводит к следующим выражениям:

$$J_{\alpha} = \frac{1}{4} \text{Sp}(Z^T \tilde{D} \tilde{\gamma}_{\alpha} Z), \quad (23)$$

$$H_{\alpha\beta} = -\frac{1}{8} \text{Sp}(Z^T \tilde{D} \tilde{S}_{\alpha\beta} Z). \quad (24)$$

Отметим, что любая другая вещественная бинарная комбинация, построенная с помощью матрицы Z и отличная от (23) и (24), тождественно равна нулю. Так, равны нулю

$$\text{Sp}(Z^T \tilde{D} Z); \text{Sp}(Z^T \tilde{D} \tilde{\gamma}_5 \tilde{\gamma}_{\alpha} Z); \text{Sp}(Z^T \tilde{D} \tilde{\gamma}_5 Z). \quad (25)$$

Возможность отображения матрицы M с указанными выше свойствами на матрицу Z вида (11), где множитель H определяется однозначно, представляет собой содержание того алгоритма отображения, который разработан в [5–7].

Найдем условия, при выполнении которых уравнение Дирака приводит к той же динамике в отношении величин J_{α} , $H_{\alpha\beta}$, что и соотношения (19), (21).

Предположим, что матрица Z удовлетворяет уравнению Дирака (13). Для вектора J_{α} , компоненты которого связаны с матрицей Z соотношениями (23), из уравнений Дирака сразу следует соотношение (19). Так что условия (19), следующие из условия калибровки, являются прямым следствием уравнений Дирака.

Теперь – об уравнениях (21). Вычисляем выражение $H_{\alpha^v}{}_{;v}$, входящее в соотношение (21), предполагая, что компоненты тензора $H_{\alpha\beta}$ связаны с матрицей Z соотношениями (24). Выполнив несложные преобразования с помощью уравнений Дирака (13), получим

$$\begin{aligned} H_{\alpha^v}{}_{;v} &= -\frac{1}{8} \nabla_v \left(\text{Sp}(Z^T \tilde{D} \tilde{S}_{\alpha^v} Z) \right) = \\ &= -\frac{1}{8} \text{Sp} \left(\left(\nabla_{\alpha} Z^+ \right) \tilde{D} Z - Z^+ \tilde{D} (\nabla_{\alpha} Z) \right) + m J_{\alpha}. \end{aligned} \quad (26)$$

Для совпадения соотношения (26) с (21) необходимо, чтобы, во-первых, выполнялось соотношение

$$m = \sqrt{\lambda}, \quad (27)$$

а во-вторых, чтобы первое слагаемое в выражении (26) было тождественно равно нулю, т. е. чтобы было

$$\text{Sp} \left(\left(\nabla_{\alpha} Z^+ \right) \tilde{D} Z - Z^+ \tilde{D} (\nabla_{\alpha} Z) \right) = 0. \quad (28)$$

2.3. Выражение для калибровочного поля

Проанализируем соотношение (28). Если иметь в виду, что

$$D = (Z^+ \tilde{D} Z), \quad D^{-1} = \left(Z^{-1} \tilde{D}^{-1} Z^{+1} \right), \quad (29)$$

то выражение (28) примет вид

$$\text{Sp}(\Gamma_{\alpha} D) = \frac{1}{2} \text{Sp} \left((n_{\alpha} - n_{\alpha}^+) D \right). \quad (30)$$

Здесь использовано обозначение

$$\left(Z^{-1} Z_{;\alpha} \right) \equiv n_{\alpha}, \quad (31)$$

а матрица D определена согласно формуле (29).

Запишем общее разложение величины Γ_{α} по полной системе из шести антисимметричных вещественных матриц

$$\Gamma_{\alpha} = U_{\alpha}(x) D^{-1} + V_{\alpha}(x) \gamma_5 D^{-1} + W_{\alpha}^{\beta}(x) \gamma_5 \gamma_{\beta} D^{-1}. \quad (32)$$

В качестве полной системы мы использовали в выражении (32) систему, связанную с мировыми ДМ. Подставив (32) в (30), видим, что условием (30) регламентируется только функция $U_{\alpha}(x)$, причем она должна быть равной

$$U_{\alpha}(x) = \frac{1}{8} \text{Sp} \left((n_{\alpha} - n_{\alpha}^+) D \right). \quad (33)$$

Поэтому общим выражением для матричной связности, удовлетворяющим условию (30), является

$$\Gamma_{\alpha} = D^{-1} \frac{1}{8} \text{Sp} \left((n_{\alpha} - n_{\alpha}^+) D \right) + \tilde{\Gamma}_{\alpha}, \quad (34)$$

где $\tilde{\Gamma}_{\alpha}$ – свободная часть калибровочных полей, удовлетворяющая условию

$$\text{Sp}(\tilde{\Gamma}_{\alpha} D) = 0 \quad (35)$$

и имеющая, следовательно, вид

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha} = V_{\alpha}(x) \gamma_5 D^{-1} + W_{\alpha}^{\beta}(x) \gamma_5 \gamma_{\beta} D^{-1}. \quad (36)$$

Матричная связность в явном виде

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha} &= D^{-1} \frac{1}{8} \text{Sp} \left((n_{\alpha} - n_{\alpha}^+) D \right) + V_{\alpha}(x) \gamma_5 D^{-1} + \\ &+ W_{\alpha}^{\beta}(x) \gamma_5 \gamma_{\beta} D^{-1}. \end{aligned} \quad (37)$$

Матричная связность Γ_{α} вида (37) представляет собой совокупность калибровочных полей, соответствующих группе $O(4)$ – общей группе инвариантных преобразований в теории матричных пространств. Правила преобразования калибровочных полей, входящих в конструкцию Γ_{α} , следуют из общего правила преобразования матричной связности при вещественных унитарных преобразованиях вида

$$Z \rightarrow Z' = ZU^{-1}, \quad Z^+ \rightarrow Z'^+ = UZ^+. \quad (38)$$

При этих преобразованиях должно выполняться соотношение

$$\Gamma_\alpha \rightarrow \Gamma'_\alpha = U\Gamma_\alpha U^{-1} + UU^{-1};_\alpha. \quad (39)$$

Заметим, что хотя выделение из матричной связности свободной компоненты всегда может быть сделано, но эта операция не инвариантна относительно общей группы преобразований (38). Если биспинорная матрица записывается в виде какого-то анзаца и в процессе рассмотрения требуется сохранение этой формы записи, то группа инвариантных преобразований сужается до какой-то подгруппы $O(4)$. Относительно подгруппы выделение из матричной связности свободной компоненты может быть инвариантной операцией.

2.4. Об уравнениях Янга – Миллса

Обычно в квантовой теории поля (см., например, [11–13] в качестве базовой формы лагранжиана используется эффективный лагранжиан, эквивалентный следующему:

$$L = \frac{i}{2} \text{Sp} \left\{ Z^+ \tilde{D} \tilde{\gamma}^\nu (\nabla_\nu Z) - (\nabla_\nu Z^+) \tilde{D} \tilde{\gamma}^\nu Z + 2mZ^+ \tilde{D}Z \right\} + \theta \text{Sp} \left\{ P^{\mu\nu} P_{\mu\nu} \right\}. \quad (40)$$

Здесь θ – безразмерная константа; $P_{\mu\nu}$ – тензор матричной кривизны;

$$P_{\alpha\beta} = \Gamma_{\beta,\alpha} - \Gamma_{\alpha,\beta} + \Gamma_\alpha \Gamma_\beta - \Gamma_\beta \Gamma_\alpha. \quad (41)$$

Варьирование лагранжиана L (40) по δZ^+ приводит, как известно, к уравнению Дирака (13). Для получения уравнений для калибровочных полей обычно лагранжиан (40) варьируют по матричной связности $\delta\Gamma_\alpha$ и в результате приходят к уравнениям Янга – Миллса

$$\nabla_\nu P_\alpha{}^\nu = \text{Sp} \left\{ \frac{i}{8\theta} Z^+ \tilde{D} \tilde{\gamma}_\alpha Z + C.C. \right\}. \quad (42)$$

Символ $C.C.$ означает выражение, получаемое комплексным сопряжением члена, содержащегося в фигурных скобках.

В рассматриваемой нами схеме использование эффективного лагранжиана в форме (40), вообще говоря, неправомерно по двум причинам. Во-первых, для вещественных Z биспинорная часть этого лагранжиана равна нулю не в силу уравнений экстремалей (как в обычных подходах), а равна нулю тождественно. Во-вторых, в силу вещественности Γ_α равен нулю и ток в уравнениях Янга – Миллса, что означает, что все калибровочные поля являются свободными. Такой вывод противоречит полученной выше формуле (37), из которой следует, что матричная связность может включать не только свободные поля, но и поля, порождаемые матрицей Z .

Возможный вариант использования лагранжиана (40) мог бы состоять в комплексификации Z и использовании ограничений на вариации $\delta\Gamma_\alpha$, вытекающих из

вида матричной связности (37). Мы, однако, не будем здесь заниматься усовершенствованием вариационного принципа. Мы просто предположим, что в нашей схеме имеет силу уравнение Дирака (13), часть матричной связности $D^{-1} \frac{1}{8} \text{Sp} \left((n_\alpha - n_\alpha^+) D \right)$ порождается биспинорной матрицей, а оставшаяся часть $\tilde{\Gamma}_\alpha$ удовлетворяет уравнениям Янга – Миллса в форме (42) с нулевой правой частью.

2.5. Резюме

Таким образом, мы доказали, что динамика величин $J_\alpha, H_{\alpha\beta}$, вытекающая из уравнений КГД (21) и условия (19), следующего из условия калибровки, эквивалентна динамике этих величин, вытекающей из уравнений Дирака, если:

- масса m связана с константой λ соотношением (27);

- матричная связность Γ_α определяется по формуле (37), в которой калибровочные поля, содержащиеся в $\tilde{\Gamma}_\alpha$, удовлетворяют условию (35) и являются свободными, т. е. удовлетворяют уравнениям Янга – Миллса с нулевыми токовыми членами.

Поле матричной связности Γ_α входит в уравнение Дирака через ковариантную производную. Тем самым оно влияет на движение частиц со спином $1/2$. С другой стороны, движение частиц оказывает влияние на динамику Γ_α через ту часть матричной связности, которая связана с биспинорной матрицей, т. е. через $D^{-1} \frac{1}{8} \text{Sp} \left((n_\alpha - n_\alpha^+) D \right)$. Это означает, что в схеме учитывается движение частиц не только во внешнем поле, но учитываются и радиационные эффекты.

3. Анализ биспинорного содержания матрицы Z

3.1. Система матриц $\{n_{ls} P_{\eta\lambda}\}$

Биспинорные состояния, реализующие неприводимые представления группы Лоренца, выделяются из биспинорной матрицы Z путем умножения Z справа на проекторы $P_{\eta,\lambda}$ ($\eta, \lambda = +1, -1$). Ранг матрицы Z равен четырем, а матриц $P_{\eta,\lambda}$ – единице. С помощью системы проекторов $\{P_{\eta,\lambda}\}$ может быть построена полная система матриц 4×4 вида $\{n_{l,s} P_{\eta,\lambda}\}$. Здесь $n_{l,s}$ ($l, s = +1, -1$) – некоторая система четырех матриц, которая всегда существует (см., напр., [10]).

Систему проекторов $\{P_{\eta,\lambda}\}$ и связанных с ними матриц $\{n_{l,s}\}$ выберем в простейшем виде

$$P_{\eta\lambda} = \frac{1}{4}[E + \eta\rho_3][E + \lambda\sigma_3]; \quad (43)$$

$$n_{++} = E; \quad n_{+-} = \sigma_1; \quad n_{-+} = \rho_1; \quad n_{--} = \rho_1\sigma_1. \quad (44)$$

Полная система вещественных матриц 4×4 будет состоять тогда из следующих матриц:

$$\left. \begin{aligned} n_{++}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[E + \eta\rho_3 + \lambda\sigma_3 + \eta\lambda\rho_3\sigma_3]; \\ n_{+-}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\sigma_1 + \eta\rho_3\sigma_1 - i\lambda\sigma_2 - i\eta\lambda\rho_3\sigma_2]; \\ n_{-+}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\rho_1 - i\eta\rho_2 + \lambda\rho_1\sigma_3 - i\eta\lambda\rho_2\sigma_3]; \\ n_{--}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\rho_1\sigma_1 - i\eta\rho_2\sigma_1 - i\lambda\rho_1\sigma_2 - \eta\lambda\rho_2\sigma_2]. \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Система матриц (43), (44), (45) удовлетворяет соотношениям

$$\left. \begin{aligned} P_{\eta,\lambda}P_{\eta',\lambda'} &= \delta_{\eta,\eta'}\delta_{\lambda,\lambda'}P_{\eta,\lambda}; \quad \sum_{\eta,\lambda} P_{\eta,\lambda} = E; \\ n_{l,s}P_{\eta,\lambda} &= P_{(\eta l),(\lambda s)}n_{l,s}; \\ n_{l,s}n_{l',s'} &= n_{(ll'),(ss')}; \quad (n_{l,s})^2 = E. \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

Матрицы (45) могут быть выражены через ДМ в майорановском представлении. Систему ДМ в майорановском представлении возьмем в виде (тильды сверху опускаем)

$$\left(\begin{array}{c} E \\ \gamma_5 = i\rho_2\sigma_3 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \gamma_0 = -i\rho_2\sigma_1 \\ \gamma_1 = \rho_1 \\ \gamma_2 = \rho_2\sigma_2 \\ \gamma_3 = \rho_3 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \gamma_0\gamma_1 = -\rho_3\sigma_1 \\ \gamma_0\gamma_2 = \sigma_3 \\ \gamma_0\gamma_3 = \rho_1\sigma_1 \\ \gamma_2\gamma_3 = i\rho_1\sigma_2 \\ \gamma_3\gamma_1 = i\rho_2 \\ \gamma_1\gamma_2 = i\rho_3\sigma_2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \gamma_5\gamma_0 = i\sigma_2 \\ \gamma_5\gamma_1 = \rho_3\sigma_3 \\ \gamma_5\gamma_2 = \sigma_1 \\ \gamma_5\gamma_3 = \rho_1\sigma_3 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} D = \gamma_0 \\ D^{-1} = -\gamma_0 \end{array} \right). \quad (47)$$

Матрицы (43), (44), (45) запишутся тогда в виде

$$P_{\eta\lambda} = \frac{1}{4}[E + \eta\gamma_3][E + \lambda\gamma_0\gamma_2]; \quad (48)$$

$$n_{++} = E; \quad n_{+-} = \gamma_5\gamma_2; \quad n_{-+} = \gamma_1; \quad n_{--} = \gamma_0\gamma_3; \quad (49)$$

$$\left. \begin{aligned} n_{++}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[E + \eta\gamma_3 + \lambda\gamma_0\gamma_2 + \eta\lambda\gamma_5\gamma_1]; \\ n_{+-}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\gamma_5\gamma_2 - \eta\gamma_0\gamma_1 - \lambda\gamma_5\gamma_0 - \eta\lambda\gamma_1\gamma_2]; \\ n_{-+}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\gamma_1 - \eta\gamma_3\gamma_1 + \lambda\gamma_5\gamma_3 - \eta\lambda\gamma_5]; \\ n_{--}P_{\eta\lambda} &= \frac{1}{4}[\gamma_0\gamma_3 + \eta\gamma_0 - \lambda\gamma_2\gamma_3 - \eta\lambda\gamma_2]. \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

3.2. Уравнение Дирака в квантовой электродинамике

Этот пункт носит вспомогательный характер и необходим для анализа физического смысла получаемых далее анзацевых выражений для биспиноров.

Исторически при записи уравнения Дирака в КЭД с самого начала наиболее часто использовались ДМ в так называемом стандартном представлении

$$\gamma_0 = -i\rho_3; \quad \gamma_1 = \rho_2\sigma_1; \quad \gamma_2 = \rho_2\sigma_2; \quad \gamma_3 = \rho_2\sigma_3. \quad (51)$$

Однако аппарат КЭД обладает инвариантностью по отношению к унитарным преобразованиям. В силу этой инвариантности в КЭД могут быть использованы ДМ в любых представлениях, если эти ДМ связаны с ДМ в стандартном представлении унитарным преобразованием. Одним из таких представлений является майорановское (вещественное) представление (47). Сейчас мы запишем уравнение Дирака, используя ДМ именно в этом представлении.

Волновая функция Ψ , описывающая в КЭД поведение электрона во внешнем электромагнитном поле, является комплексным 4-компонентным одностолбцовым биспинором

$$\Psi = \psi + i\varphi, \quad (52)$$

где ψ, φ – вещественные 4-компонентные биспиноры. В матричной записи имеем

$$\begin{array}{|c|} \hline \Psi_1 \\ \hline \Psi_2 \\ \hline \Psi_3 \\ \hline \Psi_4 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \psi_1 \\ \hline \psi_2 \\ \hline \psi_3 \\ \hline \psi_4 \\ \hline \end{array} + i \begin{array}{|c|} \hline \varphi_1 \\ \hline \varphi_2 \\ \hline \varphi_3 \\ \hline \varphi_4 \\ \hline \end{array}.$$

Для Ψ уравнение Дирака записывается в виде

$$\gamma^\nu (\partial_\nu \Psi) - i(A_\nu \gamma^\nu) \Psi + m\Psi = 0. \quad (53)$$

Поскольку ДМ вещественны, то после подстановки (52) в (53) получаем два уравнения

$$\left. \begin{array}{l} \gamma^\nu (\partial_\nu \psi) + (A_\nu \gamma^\nu) \varphi + m\psi = 0; \\ \gamma^\nu (\partial_\nu \varphi) - (A_\nu \gamma^\nu) \psi + m\varphi = 0. \end{array} \right\} \quad (54)$$

3.3. Свободное абелево калибровочное поле

Рассмотрим случай, когда биспинорная матрица записывается в виде анзаца

$$Z = (an_{++} + bn_{+-})P_{++} + (cn_{++} + dn_{+-})P_{+-} + (xP_{-+} + yP_{--}), \quad (55)$$

где a, b, c, d, x, y – функции координат. В явном виде матрица Z вида (55) и матрица Z^{-1} с помощью соотношений пункта 3.1 записываются в виде*

$$Z = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline a & d & & \\ \hline b & c & & \\ \hline & & x & \\ \hline & & & y \\ \hline \end{array}, \quad Z^{-1} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline c/(ac-bd) & -d/(ac-bd) & & \\ \hline -b/(ac-bd) & a/(ac-bd) & & \\ \hline & & 1/x & \\ \hline & & & 1/y \\ \hline \end{array}.$$

Выражение, аналогичное (55), для Z^{-1} имеет вид

$$Z^{-1} = \left(\frac{cn_{++} - bn_{+-}}{ac - bd} \right) P_{++} + \left(\frac{an_{++} - dn_{+-}}{ac - bd} \right) P_{+-} + \left(\frac{1}{x} P_{-+} + \frac{1}{y} P_{--} \right).$$

Подставляя Z вида (55) в формулу (31), находим величину n_α

$$n_\alpha = \left(\frac{(ca_{,\alpha} - db_{,\alpha})n_{++} + (ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha})n_{+-}}{ac - bd} \right) P_{++} + \left(\frac{(ac_{,\alpha} - bd_{,\alpha})n_{++} + (cd_{,\alpha} - dc_{,\alpha})n_{+-}}{ac - bd} \right) P_{+-} + \left(\frac{x_{,\alpha}}{x} P_{-+} + \frac{y_{,\alpha}}{y} P_{--} \right).$$

Из этого выражения следует, что

$$n_\alpha - n_\alpha^+ = \frac{(ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha} - cd_{,\alpha} + dc_{,\alpha})n_{+-}}{ac - bd} (P_{++} - P_{+-}) = - \left(\frac{ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha} - cd_{,\alpha} + dc_{,\alpha}}{ac - bd} \right) \tilde{\gamma}_5 \tilde{\gamma}_0 \frac{1}{2} (E + \tilde{\gamma}_3). \quad (56)$$

Обозначим вектор, входящий в конструкцию $\frac{1}{2}(n_\alpha - n_\alpha^+)$, через $B_\alpha(x)$,

* Здесь и далее подразумевается, что пустые клетки – это клетки с нулевыми элементами.

$$B_\alpha = -2 \left(\frac{ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha} - cd_{,\alpha} + dc_{,\alpha}}{ac - bd} \right).$$

Соотношение (56) запишется тогда в виде

$$\frac{1}{2}(n_\alpha - n_\alpha^+) = -B_\alpha n_{+-} (P_{++} - P_{+-}) = -\frac{1}{2} B_\alpha (-\tilde{\gamma}_5 \tilde{\gamma}_0 - \tilde{\gamma}_1 \tilde{\gamma}_2) = B_\alpha \tilde{\gamma}_5 \tilde{\gamma}_0 \frac{1}{2} (E + \tilde{\gamma}_3). \quad (57)$$

Для нахождения вклада $(n_\alpha - n_\alpha^+)$ в матричную связность необходимо вычислить $\text{Sp}((n_\alpha - n_\alpha^+)D)$. Из формулы (29) следует

$$D = (Z^+ \tilde{D} Z) = Z^+ \tilde{\gamma}_0 Z = \{(an_{++} + dn_{+-})P_{++} + (cn_{++} + bn_{+-})P_{+-} + (xP_{-+} + yP_{--})\} \\ \tilde{\gamma}_0 \{P_{++}(an_{++} + dn_{+-}) + P_{+-}(cn_{++} + bn_{+-}) + (xP_{-+} + yP_{--})\}.$$

Преобразовав полученное соотношение с помощью формулы

$$\tilde{\gamma}_0 P_{\eta\lambda} = \eta n_{--} P_{\eta\lambda},$$

находим

$$D = (xbn_{-+} + yan_{--})P_{++} + (xcn_{--} + ydn_{-+})P_{+-} - x(cn_{--} + bn_{-+})P_{-+} - y(an_{--} + dn_{-+})P_{--}. \quad (58)$$

Из выражений (58), (57) следует, что для матрицы Z вида (55)

$$\text{Sp}((n_\alpha - n_\alpha^+)D) \equiv 0.$$

Учитывая полученное соотношение и пользуясь формулой (37), находим, что матричная связность Γ_α , совместимая с биспинорной матрицей (55), записывается в виде

$$\Gamma_\alpha = V_\alpha(x)\gamma_5 D^{-1} + W_\alpha^\beta(x)\gamma_5 \gamma_\beta D^{-1}. \quad (59)$$

Далее рассмотрим случай калибровочного поля вида

$$\Gamma_\alpha = B_\alpha \tilde{\gamma}_5 \tilde{\gamma}_0 \frac{1}{2} (E + \tilde{\gamma}_3). \quad (60)$$

Поле является абелевым и свободным. Следовательно, оно удовлетворяет уравнениям

$$g^{\mu\nu} (B_{\alpha,\nu} - B_{\nu,\alpha})_{;\mu} = 0. \quad (61)$$

Умножим уравнение Дирака (13) справа на проектор $P_{\eta\lambda}$. Введя обозначения

$$ZP_{\eta\lambda} \equiv \Psi_{\eta\lambda}, \quad (62)$$

получим

$$\gamma^\nu (\partial_\nu \Psi_{\eta\lambda}) - \gamma^\nu Z \Gamma_\nu P_{\eta\lambda} + m \Psi_{\eta\lambda} = 0. \quad (63)$$

Нетрудно показать, что биспиноры Ψ_{-+}, Ψ_{--} вообще не реагируют на присутствие калибровочного поля (60).

Для этих биспиноров уравнение Дирака имеет вид

$$\left. \begin{aligned} \gamma^\nu (\partial_\nu \Psi_{-+}) + m \Psi_{-+} &= 0; \\ \gamma^\nu (\partial_\nu \Psi_{--}) + m \Psi_{--} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (64)$$

Что касается биспиноров Ψ_{++}, Ψ_{+-} , то по отношению к калибровочному полю (60) они представляют собой пару биспиноров, аналогичную вещественной и мнимой частям комплексного биспинора в квантовой электродинамике по отношению к внешнему электромагнитному полю с потенциалом B_α . В этом пункте соответствующие доказательства мы опускаем, поскольку аналогичные подробные вычисления будут проведены в следующем пункте.

Предположим, что матрица Z имеет вид (55) и удовлетворяет уравнению Дирака (13) со связностью вида (60). Найдем по формуле (23) вектор плотности тока частиц J_α , а по формуле (20) найдем тензор $H_{\alpha\beta}$. Тогда мы можем быть уверены в том, что вектор J_α удовлетворяет соотношению (19), а тензор $H_{\alpha\beta}$ – уравнениям (21). То есть тем соотношениям, которые представляют собой следствия уравнений (1) с правой частью $T_{\alpha\beta}$ вида (2).

3.4. Абелево калибровочное поле, генерируемое биспинорной матрицей

Теперь рассмотрим случай, когда биспинорная матрица имеет вид

$$Z = (an_{++} + bn_{--})P_{++} + (cn_{++} + dn_{--})P_{--} + (xn_{++}P_{+-} + yn_{++}P_{-+}), \quad (65)$$

где a, b, c, d, x, y – функции координат, подлежащие определению. Для наглядности приводим явный вид матрицы Z , а также матрицы Z^{-1}

$$Z = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline a & & & d \\ \hline & x & & \\ \hline & & y & \\ \hline b & & & c \\ \hline \end{array}, \quad Z^{-1} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline c/(ac-bd) & & & -d/(ac-bd) \\ \hline & 1/x & & \\ \hline & & 1/y & \\ \hline -b/(ac-bd) & & & a/(ac-bd) \\ \hline \end{array}.$$

Подставляя Z вида (65) в формулу (31), находим величину n_α

$$n_\alpha = \frac{(ca_{,\alpha} - db_{,\alpha}) + (ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha})n_{--}}{ac-bd} P_{++} + \frac{(ac_{,\alpha} - bd_{,\alpha}) + (cd_{,\alpha} - dc_{,\alpha})n_{--}}{ac-bd} P_{--} + \left(\frac{x_{,\alpha}}{x} P_{+-} + \frac{y_{,\alpha}}{y} P_{-+} \right). \quad (66)$$

По формуле (37) находим, что матричная связность Γ_α , порождаемая биспинорной матрицей (65), записывается в виде

$$\Gamma_\alpha = \frac{(ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha}) - (cd_{,\alpha} - dc_{,\alpha})}{ac-bd} \gamma_0. \quad (67)$$

Здесь мы положили свободную часть матричной связности равной нулю. Обозначим

$$B_\alpha \equiv 2 \frac{(ab_{,\alpha} - ba_{,\alpha}) - (cd_{,\alpha} - dc_{,\alpha})}{(ac-bd)}.$$

Тогда выражение (67) для Γ_α примет вид

$$\Gamma_\alpha = B_\alpha \gamma_0 \frac{1}{2} [E + \gamma_5 \gamma_1] + B_\alpha \gamma_0 \frac{1}{2} [E - \gamma_5 \gamma_1]. \quad (68)$$

Пользуемся обозначениями (62) для $\Psi_{\eta\lambda}$ и уравнением Дирака в форме (63). Для записи (63) в терминах биспиноров $\Psi_{\eta\lambda}$ вычислим несколько вспомогательных величин. Прямым вычислением убеждаемся в том, что

$$P_{\eta\lambda} \gamma_0 = -\eta P_{\eta\lambda} n_{--} = -\eta n_{--} P_{(-\eta),(-\lambda)}. \quad (69)$$

$$Z \Gamma_\alpha = B_\alpha Z \gamma_0 (P_{++} + P_{--}); \quad \gamma^\nu Z \Gamma_\nu P_{\eta\lambda} = (B_\nu \gamma^\nu) Z \gamma_0 (P_{++} + P_{--}). \quad (70)$$

Матрица Z , как и любая матрица 4×4 , может быть записана в виде

$$Z = \sum_{\eta,\lambda,l,s} Z_{\eta,\lambda,l,s} n_{l,s} P_{\eta,\lambda}. \quad (71)$$

При этом величина $\Psi_{\eta\lambda}$, определенная соотношением (62), связана с величинами $Z_{\eta,\lambda,l,s}$ следующим образом:

$$\Psi_{\eta,\lambda} = \sum_{l,s} Z_{\eta,\lambda,l,s} n_{l,s} P_{\eta,\lambda} \quad (\text{суммирование по } \eta, \lambda \text{ нет}).$$

Ясно, что рассматриваемая нами биспинорная матрица (65) является частным случаем матриц в форме (71). Отсюда следует, что все выводы, которые будут получены относительно матриц вида (71), будут применимы и к матрицам вида (65).

Величина $Z \gamma_0$ может быть с учетом (69) преобразована к виду

$$\begin{aligned} Z \gamma_0 &= \sum_{\eta,\lambda,l,s} Z_{\eta,\lambda,l,s} n_{l,s} P_{\eta,\lambda} \gamma_0 = \sum_{\eta,\lambda,l,s} (-\eta Z_{\eta,\lambda,l,s} n_{l,s} n_{--} P_{(-\eta),(-\lambda)}) = \\ &= \sum_{\eta,\lambda,l,s} (-\eta Z_{\eta,\lambda,l,s} n_{(-l),(-s)} P_{(-\eta),(-\lambda)}) = \sum_{\eta,\lambda,l,s} (\eta Z_{(-\eta),(-\lambda),(-l),(-s)} n_{l,s} P_{\eta,\lambda}). \end{aligned} \quad (72)$$

Учитывая (70), получаем

$$\begin{aligned} \gamma^\nu Z \Gamma_\nu P_{\eta\lambda} &= (B_\nu \gamma^\nu) \sum_{\eta',\lambda',l,s} (\eta Z_{(-\eta'),(-\lambda'),(-l),(-s)} n_{l,s} P_{\eta',\lambda'}) (P_{++} + P_{--}) P_{\eta\lambda} = \\ &= (B_\nu \gamma^\nu) \sum_{l,s} \delta_{\eta,+} \delta_{\lambda,+} (Z_{(-),(-),(-l),(-s)} n_{l,s} P_{++}) - (B_\nu \gamma^\nu) \sum_{l,s} \delta_{\eta,-} \delta_{\lambda,-} (Z_{(+),(+),(-l),(-s)} n_{l,s} P_{--}). \end{aligned} \quad (73)$$

После умножения уравнения (63) справа на P_{++} получаем уравнения Дирака в следующем виде:

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{++}) - (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \left\{ \sum_{l,s} (Z_{-,-,(-l),(-s)} n_{l,s} P_{++}) \right\} + m \Psi_{++} = 0. \quad (74)$$

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{--}) + (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \left\{ \sum_{l,s} (Z_{+,+,(+l),(+s)} n_{l,s} P_{--}) \right\} + m \Psi_{--} = 0. \quad (75)$$

Учитывая явный вид матриц $\{n_{ls} P_{\eta\lambda}\}$ (45), мы можем биспиноры Ψ_{++} , Ψ_{--} записать как

$$\Psi_{++} = \sum_{l,s} Z_{+,+,(l),(s)} n_{l,s} P_{+,+} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline Z_{++++} & & & \\ \hline Z_{++++-} & & & \\ \hline Z_{+++++} & & & \\ \hline Z_{++++-} & & & \\ \hline \end{array}, \quad (76)$$

$$\Psi_{--} = \sum_{l,s} Z_{-,-,(l),(s)} n_{l,s} P_{-,-} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & Z_{----} \\ \hline & & & Z_{----+} \\ \hline & & & Z_{----+} \\ \hline & & & Z_{----+} \\ \hline \end{array}. \quad (77)$$

Рассмотрим, что представляют собой биспиноры, содержащиеся в фигурных скобках в (74), (75), т. е. биспиноры

$$\Phi_{++} \equiv \sum_{l,s} (Z_{-,-,(-l),(-s)} n_{l,s} P_{++}); \quad (78)$$

$$\Phi_{--} \equiv -\sum_{l,s} (Z_{+,+,(+l),(+s)} n_{l,s} P_{--}). \quad (79)$$

Запишем биспиноры (78), (79) в явном матричном виде

$$\Phi_{++} \equiv \sum_{l,s} (Z_{-,-,(-l),(-s)} n_{l,s} P_{++}) = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline Z_{----} & & & \\ \hline Z_{----+} & & & \\ \hline Z_{----+} & & & \\ \hline Z_{----+} & & & \\ \hline \end{array}, \quad (80)$$

$$\Phi_{--} \equiv -\sum_{l,s} (Z_{+,+,(+l),(+s)} n_{l,s} P_{--}) = - \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & Z_{++++} \\ \hline & & & Z_{++++-} \\ \hline & & & Z_{++++-} \\ \hline & & & Z_{++++-} \\ \hline \end{array}. \quad (81)$$

С учетом выражений (80), (81) уравнения (74), (75) записываются теперь как

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{++}) - (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \Phi_{++} + m \Psi_{++} = 0; \quad (82)$$

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{--}) - (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \Phi_{--} + m \Psi_{--} = 0. \quad (83)$$

Умножаем уравнение (83) на n_{--} справа

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{--} n_{--}) - (B_{\nu} \gamma^{\nu}) (\Phi_{--} n_{--}) + m (\Psi_{--} n_{--}) = 0. \quad (84)$$

Прямым вычислением убеждаемся в справедливости тождеств

$$(\Psi_{--} n_{--}) = \Phi_{++}. \quad (85)$$

$$(\Phi_{--} n_{--}) = -\Psi_{++}. \quad (86)$$

В результате уравнения (82) и (83) принимают следующий вид:

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Psi_{++}) - (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \Phi_{++} + m \Psi_{++} = 0, \quad (87)$$

$$\gamma^{\nu} (\partial_{\nu} \Phi_{++}) + (B_{\nu} \gamma^{\nu}) \Psi_{++} + m \Phi_{++} = 0. \quad (88)$$

Таким образом, для двух заряженных биспинорных состояний Ψ_{++} и Ψ_{--} получены уравнения Дирака (82) и (88). Оба уравнения записаны в терминах только двух 4-компонентных столбцовых биспиноров Ψ_{++} и Φ_{++} , причем последний связан однозначно с Ψ_{--} .

Аналогичным образом могут быть получены уравнения Дирака для двух других биспинорных состояний Ψ_{+-} , Ψ_{-+} .

Биспинорная матрица в целом имеет при этом вид (65), а матричная связность, генерируемая Z , имеет вид (68).

Сравниваем два уравнения (54) с двумя уравнениями (82) и (88) и приходим к выводу об их эквивалентности с точностью до переобозначений

$$\Psi_{++} \leftrightarrow \psi; \quad \Phi_{++} \leftrightarrow \varphi; \quad B_\alpha \leftrightarrow A_\alpha. \quad (89)$$

Таким образом, уравнения (82) и (88) совпали с уравнениями Дирака, используемыми в КЭД для описания динамики заряженной частицы со спином $1/2$, находящейся во внешнем электромагнитном поле. Однако в рассматриваемом случае поле $B_\alpha(x)$, являющееся аналогом электромагнитного поля, включает только поле, создаваемое самой частицей. По существу, мы получаем описание динамики заряженных биспинорных состояний, взаимодействующих со своим собственным полем.

Предположим, что матрица Z имеет вид (65) и удовлетворяет уравнению Дирака (13) со связностью вида (68). Найдем по формуле (23) вектор плотности тока частиц J_α , а по формуле (20) найдем тензор $H_{\alpha\beta}$. Тогда можно быть уверенным в том, что вектор J_α удовлетворяет соотношению (19), а тензор $H_{\alpha\beta}$ – уравнениям (21), т. е. тем соотношениям, которые представляют собой следствия уравнений (1) с правой частью $T_{\alpha\beta}$ вида (2).

В пунктах 3.3 и 3.4 рассмотрена ситуация, когда калибровочное поле является абелевым. Ясно, что в общем случае, когда матричная связность имеет вид (37), биспинорная матрица реализует представление группы $O(4)$. Если использовать проекторы специального вида и потребовать, чтобы при преобразованиях проекторы не изменялись, общая группа симметрии сужается до своих подгрупп. Пример такого рассмотрения приведен в работе [10]. Пример относится к случаю электрослабых взаимодействий электронного лептонного поколения и калибровочной группы $SU(2) \otimes U(1)$.

4. Обсуждение результатов

Итак, в данной работе доказано, что динамика величин J_α , $H_{\alpha\beta}$, вытекающая из уравнений конформной геометродинамики, может быть сформулирована эквивалентным образом в терминах биспинорной матрицы Z , удовлетворяющей уравнению Дирака, и соот-

ветствующей этой матрице матричной связности Γ_α . Необходимые и достаточные условия для отображения одной динамики на другую состоят в следующем (при калибровке $\lambda = \text{const}$):

I. Масса m и константы λ должны быть связаны соотношением (27).

II. Матричная связность Γ_α должна определяться по формуле (37).

Сам метод отображения основан на предложенном ранее в работах [5–7] алгоритме отображения тензорных величин на биспиноры.

Если предположить, что реализовываться в природе может только то, что описывается уравнениями (1) с правой частью (2), то мы придем к неожиданному выводу. Прежде чем сформулировать этот вывод, заметим, что уравнения общей теории относительности и уравнения КГД обычно ассоциируются с явлениями, характерный масштаб размеров которых соизмерим с размерами галактик, звезд и т. д. Из нашего же рассмотрения следует, что дополнительные геометрические величины A_α , λ , появляющиеся в уравнениях КГД, связаны напрямую с квантовыми явлениями микромира. В этом и состоит неожиданность вывода. Другими словами, решая уравнение Дирака для электронов в поле атомного ядра и удовлетворяя перечисленные выше условия I, II, мы фактически решаем геометродинамическую задачу о нахождении A_α , λ . Поэтому полученные результаты представляют собой, по существу, квантовополевую интерпретацию КГД. Более того, из полученных результатов следует физический смысл вектора $A_\alpha(x)$. Этот вектор в калибровке $\lambda = \text{const}$ пропорционален вектору плотности тока частиц со спином $1/2$.

Возможности интерпретировать геометрические объекты типа A_α , λ в терминах волновых уравнений и характеристик частиц со спином $1/2$, т. е. реально наблюдаемых элементарных частиц, не было и не могло быть ни в одной из схем геометризации физики. Возможность использования такого подхода появилась только после установления общего алгоритма отображения тензоров на биспиноры.

В любой схеме, основанной на эффективном лагранжиане типа (40) и на вытекающих из него уравнениях Янга – Миллса, биспинорная матрица описывает различные состояния частиц со спином $1/2$ в зависимости от используемой при рассмотрении системы проекторов и группы симметрии калибровочных полей. Аналогичная ситуация имеет место и для биспинорной матрицы Z и матричной связности Γ_α , описывающих динамику величин J_α , $H_{\alpha\beta}$. В работе показано, что в простейшем случае ситуация сводится к стандартной для квантовой электродинамики ситуации: электрон ведет себя в соответствии с уравнением Дирака, электромагнитное поле в котором учитывает как внешнюю компоненту, так и компоненту, порождаемую самим электроном.

Несмотря на формальное совпадение уравнения Дирака (13) для биспиноров $ZP_{\eta\lambda}$ с используемыми в

КТП уравнением Дирака, между этими уравнениями имеется принципиальное различие. Различие проистекает оттого, что состояния частиц со спином $1/2$, содержащиеся в матрице Z , равносильны состояниям, содержащимся не в одном, а в четырех столбцовых биспинорах, и оттого, что в уравнениях КТП в качестве метрического тензора используется тензор плоского пространства, а в уравнении (13) – тензор $g_{\alpha\beta}(x)$, являющийся решением уравнений (1) с тензором $T_{\alpha\beta}$ вида (2). Другими словами, в общем случае уравнение Дирака (13) не может решаться изолированно от решения геометриодинамической задачи в целом.

Аналогичное замечание относится и к решению уравнений КГД (21), (19).

В тех областях пространства, в которых метрика не может рассматриваться как декартова, продолжают действовать уравнения КГД. Можно предположить, что если бы были известны точные решения уравнений КГД, то они давали бы единое описание состояния пространства и их динамику как в областях, в которых метрика декартова, так и вне этих областей.

Вне рамок данной работы осталось много принципиальных вопросов. Например, вопрос о механизме появления различных масс элементарных частиц в предположении, что величина λ имеет космологическое происхождение и по порядку величины равна $1/R^2$, где R – радиус Вселенной. Если действует какой-то механизм перенормировки и внутри области локализации частиц лямбда-член имеет порядок $1/l_C^2$, где l_C – комптоновская длина волны, то не ясен вопрос о переходной области пространства, в которой масштаб изменения лямбда-члена может достигать $\sim 10^{80}$. В работе [14] переходная область рассматривалась как область, в которой решения уравнений КГД испытывают разрыв. Возможно, разрывные решения являются неким феноменологическим подходом и будут заменены точными гладкими решениями, когда последние будут найдены.

Обратим внимание на то, что полученные здесь результаты открывают новые возможности для понимания эффективности стандартной теории электрослабых взаимодействий, поскольку указывают на фундаментальность связи в биспинорной матрице левой и правой частей электрона и соответствующих ему нейтрино и антинейтрино. Затраченные массы каждого из состояний связаны с величиной λ , которая в рамках рассматриваемой схемы КГД не может обратиться в нуль. Поэтому массы электронного нейтрино и антинейтрино не могут быть в точности равными нулю.

Изложенная интерпретация КГД допускает некоторые очевидные обобщения. Одно из обобщений – включение сильных взаимодействий; оно может быть достигнуто, по-видимому, путем перехода от комплексных к кватернионным и октонионным дираковским матрицам. Такой переход, как показано в [15], приводит

к введению в схему 7-мерного пространства внутренних степеней свободы.

В пространстве Вейля, динамика которого описывается уравнениями КГД, параллельный перенос геометрических объектов осуществляется с помощью не только символов Кристоффеля, но и вектора A_α . Еще А. Эйнштейн критиковал в свое время схему Г. Вейля за то, что параллельный перенос геометрических объектов в пространстве Вейля приводит к выводам, противоречащим наблюдаемым данным. Например, к нарушению тождественности атомов и т. д. Результаты данной работы вносят ясность в трактовку параллельного переноса. Дело в том, что вектор A_α , как уже отмечено выше, пропорционален вектору плотности тока частиц. Поэтому при рассмотрении параллельного переноса реального физического объекта невозможно абстрагироваться от взаимодействия переносимого объекта с теми частицами, которые описываются вектором A_α на траектории переноса. С учетом взаимодействия, во-первых, исходное пространство не может считаться фиксированным, во-вторых, переносимый объект не является пробной частицей, его состояние на самом деле может изменяться в силу реальных физических взаимодействий с теми частицами, плотность тока которых описывается A_α . Другими словами, описание состояния параллельно переносимого реального (а не математического) объекта требует решения задачи в квантовомеханической постановке с учетом геометрических свойств пространства-времени. По существу, ситуация аналогична той, которая возникает при получении информации о микрообъекте с помощью квантовомеханического измерения.

В заключение заметим, что попытки связать вектор Вейля A_α с вектором плотности тока вероятности частицы уже предпринимались. Наиболее завершённой из таких попыток представляется работа [16]. В этой работе было получено уравнение Шредингера для заряженной бесспиновой нерелятивистской частицы в электромагнитном поле. Вектор Вейля имел градиентный вид и был отождествлен с вектором плотности тока вероятности частицы. Наш результат не противоречит трактовке вектора Вейля, приведенной в [16], однако носит общий характер (относительно релятивизма, спина, неградиентности вектора Вейля). Заметим, что переход в нашей схеме к нерелятивистскому пределу осуществляется в точности по методу получения уравнений Паули из уравнения Дирака.

Автор благодарит Ю. А. Романова и А. К. Хлебникова за обсуждение результатов данной работы. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Международного научно-технического центра (проект МНТЦ 1655).

Список литературы

1. Горбатенко М. В., Пушкин А. В. // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1984. Вып. 2/2. С. 40.

2. Gorbatenko M. V., Pushkin A. V. // In the Intermissions... Collected works on research into the essentials of theoretical physics in Russian Federal Nuclear Center Arzamas-16 / Ed. Yu. A. Trutnev. World Scientific. 1998. P. 54.
3. Gorbatenko M. V., Pushkin A. V. // GRG. 2002. Vol. 34, No. 2. P. 175.
4. Романов Ю. А. // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1996. Вып. 3. С. 55.
5. Gorbatenko M. V., Pushkin A. V. // Ninth Marcel Grossmann Proceedings. 2001. P. 933. [math-ph/0112048].
6. Горбатенко М. В., Пушкин А. В. // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1999. Вып. 3. С. 3.
7. Горбатенко М. В., Пушкин А. В. // Там же. С. 19.
8. Горбатенко М. В. // Там же. 2001. Вып. 3. С. 28.
9. Горбатенко М. В. // Сборник материалов заседания НТС ВНИИЭФ, посвященного 80-летию со дня рождения А.Д. Сахарова / Под ред. В. А. Устиненко. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2003. С. 144.
10. Gorbatenko M. V. // New Developments in Quantum Cosmology Research. Horizons in World Physics. 2005. Vol. 247. Nova Science Publishers, Inc. P. 185.
11. Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Квантовые поля. М.: Наука, 1993.
12. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1990.
13. Бьеркен Дж. Д., Дрелл С. Д. Релятивистская квантовая теория. Т. 1, 2. М.: Наука, 1978.
14. Gorbatenko M. V. // GRG. 2005. Vol. 37, No. 1. P. 81.
15. Gorbatenko M. V., Pushkin A. V. // GRG. 2005. Vol. 37, No. 10. P. 1705. [gr-qc/0409095].
16. Santamato E. // Phys. Rev. D. 1984. Vol. 29, No 2. P. 216.

Статья поступила в редакцию 28.10.2005

СО Д Е Р Ж А Н И Е

C O N T E N T S

Ковшов Д. К. Потери энергии ионов в простых веществах. III. Медленные ионы 3

Kovshov D. K. Stopping of ions in elemental matter. III. Slow ions 3

Садовой А. А., Ульянов А. С. Новый метод расчета ширины автоионизационных состояний при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах 10

Sadovoy A. A., Ulyanov A. S. A new method for calculation of autoionization state width in electron scattering on many-electron ions 10

Дубинова И. Д. Теория нелинейных ионно-звуковых волн в плазме с учетом инерции электронов 18

Dubinova I. D. A theory of non-linear ion-acoustic waves in a plasma with account of electron inertia 18

Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов РОСА-М. Уравнение состояния алюминия 24

Gordeev D. G., Gudarenko L. F., Zhernokletov M. V., Kudel'kin V. G., Mochalov M. A. A semiempirical equation of state model for metals ROSA-M equation of state of aluminum 24

Гужова А. Р., Павлуниин А. С., Стаценко В. П. Уточнение констант k - ε модели турбулентности на основе результатов прямого численного моделирования простейших турбулентных течений и измерений 37

Guzhova A. R., Pavlunin A. S., Statsenko V. P. Elaboration of the k - ε model coefficients on the bases of the direct numerical simulations of the simplest turbulent flows and its measurements 37

Горбатенко М. В. Квантовополевая интерпретация конформной геометродинамики 49

Gorbatenko M. V. Quantum-Field Interpretation of Conformal Geometrodynamics 49

Редактор Н. П. Мишкина

Корректор М. В. Кривова

Компьютерная подготовка оригинала-макета

А. А. Ивлева

Подписано в печать 2005

Формат 60×84^{1/8}

Офсетн. печ.

Усл. печ. л. 8

Уч.-изд. л. 9,5

Тираж 120 экз.

Зак. тип. 2045-2005

6 статей

Индекс 3657

Отпечатано в ИПК ФГУП РФЯЦ–ВНИИЭФ

607188, г. Саров Нижегородской обл.

ПД № 00568 от 22.05.2000

ISSN 0234-0763 **ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ**

С е р и я :

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

2005. Вып. 3. 1–61