

1-Теоретическая физика

Авакян Леон Александрович, магистрант 1 года
Ростовский Государственный Университет, физический
Определение координационного окружения атомов алюминия в цеолитах при изменяющихся температурах

Научный руководитель: Бугаев Лусеген Арменакович, д.ф.-м.н.
E-mail: LAvakyan@rambler.ru стр. 34

Алимагомедов Якуб Альбертович, аспирант 1 года
Дагестанский Государственный Университет, физический
Численное моделирование процесса переноса распыленных атомов в процессе получения твердых растворов (SiC)_{1-x}(AlN)_x

Научный руководитель: Рагимханов Гаджимирза Балагланович, к.ф.-м.н.
E-mail: alimagomedov_yak@mail.ru стр. 35

Бикмурзин Рустам Васильевич, 4 курс
Красноярский Государственный Университет, физический
Точное статическое решение в однородных координатах для жидкого шара

Научный руководитель: Баранов Александр Михайлович, д.ф.-м.н.
E-mail: rustam_b_v@mail.ru стр. 36

Верещагин Михаил Дмитриевич, 5 курс
Калининградский Государственный Университет, физический
Преобразование Мутара в трех измерениях

Научный руководитель: Юров А.В., к.ф.-м.н.
E-mail: ver_mishel@mail.ru стр. 37

Власов Захар Владимирович, аспирант
Красноярский Государственный Университет, физический
О модели заряженного астрофизического объекта

Научный руководитель: Баранов Александр Михайлович, д.ф.-м.н.
E-mail: raven_z@freemail.ru стр. 38

Гусаревич Евгений Степанович, ст. преподаватель
Поморский Государственный Университет, физический
Асимптотические формулы для сечений неупругих процессов при столкновениях релятивистских голых тяжёлых ионов с атомами

Научный руководитель: Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.
E-mail: gusarevich.eugeny@pomorsu.ru стр. 39

Дёмин Сергей Анатольевич, аспирант
Казанский Государственный Педагогический Университет, физический
Немарковость, случайность и эргодичность в сложных системах биологической природы на примере болезни Паркинсона

Научный руководитель: Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.
E-mail: sergey@theory.kazan-spu.ru стр. 41

Дёмин Сергей Анатольевич, аспирант
Казанский Государственный Педагогический Университет, физический
Немарковость, скорость релаксации и эффекты статистической памяти в вариабельности сердечного ритма

Научный руководитель: Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.
E-mail: sergey@theory.kazan-spu.ru стр. 42

Жуков Константин Геннадьевич, 6 курс
Ростовский Государственный Университет, физический
Буши колебательных мод в нелинейных цепочках Ферми-Пасты-Улама с точечными дефектами

Научный руководитель: Чечин Георгий Михайлович, к.ф.-м.н.
E-mail: kgz@inbox.ru стр. 44

Земскова Светлана Геннадьевна, 4 курс
Тульский Государственный Университет, естественно-научный
Особенности черенковского излучения в нелинейной среде
Научный руководитель: Колмаков Юрий Николаевич, к.ф.-м.н.
E-mail: zemskova_s_g@rambler.ru стр. 45

Каспржицкий Антон Сергеевич, магистрант 2 года
Ростовский Государственный Университет, физический
Теоретическое исследование спектра К-фотопоглощения атома Ве
Научный руководитель: Бугаев Лусеген Арминакович, д.ф.-м.н.
E-mail: anton1982@mail.ru стр. 47

Квардаков Василий Аркадьевич, аспирант
Новосибирский Государственный Технический Университет, физико-технический
Гармонический трекинг частиц в циклическом ускорителе
Научный руководитель: Г.Н. Кулипанов, академик
E-mail: v.a.kvardakov@inp.nsk.su стр. 48

Кочкин Сергей Алексеевич, аспирант
Поморский Государственный Университет, физический
Модель ионного распыления металла в виде больших кластеров
Научный руководитель: Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.
E-mail: moozey@mail.ru стр. 49

Лалетин Олег Николаевич, аспирант 1 года
Институт физики им. Киренского СО РАН, физики конденсированного состояния
Спектр магнитоупругих волн в мультислойных структурах
Научный руководитель: Игнатченко Вальтер Алексеевич, д.ф.-м.н.
E-mail: olalet@iph.krasn.ru стр. 50

Манайчев Константин Александрович, 6 курс
Новосибирский Государственный Университет, физический
Математическое моделирование процессов лазерной СВС-сварки металлов и сплавов
Научный руководитель: Ковалёв Олег Борисович, д.ф.-м.н.
E-mail: totkot@ngs.ru стр. 51

Мастропас Екатерина Валентиновна, аспирант 2 года
Ростовский Государственный Педагогический Университет, отделение физики
Возможные квантово-когерентные состояния поля промежуточных бозонов в адронах
Научный руководитель: Мясников Эдуард Николаевич, д.ф.-м.н.
E-mail: mastropas@mail.ru стр. 53

Мигаль Оксана Александровна, аспирант 2 года
Белорусский Государственный Университет, физический
Оценка статистической суммы протяженной системы двухуровневых атомов взаимодействующих с электромагнитным полем
Научный руководитель: Феранчук Илья Давыдович, д.ф.-м.н.
E-mail: Ksusha_Migal@tut.by стр. 54

Пашев Игорь Николаевич, аспирант 2 года
Поморский Государственный Университет, физический
Рождение пар и процесс ионизации при столкновениях тяжёлых релятивистских ионов
Научный руководитель: Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.
E-mail: pashev.igor@pomorsu.ru стр. 55

Попов Андрей Валерьевич, магистрант 2 года
Алтайский Государственный Университет, физико-технический
Конденсат возбужденных состояний в магнии
E-mail: andrey_popov@barnaul.ru стр. 56

Попов Виталий Валерьевич, 3 курс
Алтайский Государственный Технический Университет, факультет инженерной педагогики и информатики
Отыскание собственных значений для функционалов электронной плотности

Научный руководитель: Кантор Семен Аврамович, к.ф.-м.н.
E-mail: sauter@barnaul.ru стр. 58

Поярков Александр Александрович, аспирант
Стерлитамакская Государственная Педагогическая Академия, физико-математический
Температурные поля, иницируемые электромагнитным полем в неоднородной среде
Научный руководитель: Филиппов А.И., д.т.н.
E-mail: deodjen@mail.ru стр. 59

Рассадин Александр Эдуардович, старший инженер
ФГУП 'НПП 'Полет', физический
Точное решение уравнений комплексного скалярного поля в пространстве-времени Переса
Научный руководитель: Бурланков Дмитрий Евгеньевич, к.ф.-м.н.
E-mail: al_ras@pochta.ru стр. 60

Рябченко Сергей Васильевич, аспирант 2 года
Поморский Государственный Университет, физический
Возбуждение и ионизация снаряда при столкновениях быстрых структурных ионов с нейтральными атомами
Научный руководитель: Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.
E-mail: ryabchenko.sergey@pomorsu.ru стр. 61

Савойский Юрий Владимирович, магистрант 2 года
Кабардино-Балкарский Государственный Университет, физический
Стохастическое квантование космологических моделей
Научный руководитель: Хоконов А. Х.,
E-mail: Yurii_savoiskii@mail.ru стр. 62

Слепцова Ирина Гаврильевна, ассистент
Якутский Государственный Университет, физический
Оценка эффекта электрогравитатической поляризации проводников сферической формы
Научный руководитель: Степанов Валерий Егорович, д.ф.-м.н.
E-mail: sigira@mail.ru стр. 63

Степанова Ксения Валерьевна, ассистент
Якутский Государственный Университет, физический
Условия дифференцируемости полевых функций калибровочной теории дефектов
Научный руководитель: Степанов Валерий Егорович, д.ф.-м.н.
E-mail: Ksenia-Stepanova@ykt.ru стр. 64

Ткаченко Евгений Иванович, аспирант 2 года
Тюменский Государственный Университет, физический
О нижнем граничном условии для задачи промерзания оттаивания в двумерном случае.
E-mail: tkachenko_hotbox.ru стр. 65

Хисматуллин Азат Салаватович, 5 курс
Стерлитамакская Государственная Педагогическая Академия, физико-математический
Расчет температурных полей при фильтрационно-волновом нагреве нефтяного пласта
Научный руководитель: Филиппов Александр Иванович, д.т.н.
E-mail: hism5az@rambler.ru стр. 66

Хусаенова Эндже Вагизовна, аспирант 1 года
Казанский Государственный Педагогический Университет, физический
Релаксационные особенности сигналов магнитоэнцефалограммы (МЭГ) человека при фоточувствительной эпилепсии
Научный руководитель: Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.
E-mail: KhusaenovaEndze@mail.ru стр. 67

Хусаинов Айдар Такаевич, 4 курс
Башкирский Государственный Университет, физический
Связанные магнитоупругие волны в двухподрешеточных антиферромагнетиках MnF2
Научный руководитель: Кызыргулов Ильгиз Раянович, к.ф.-м.н.
E-mail: KizirgulovIR@mail.ru стр. 68

Определение координационного окружения атомов алюминия в цеолитах при различных температурах

Авакян Леон Александрович

Ростовский Государственный Университет

Бугаев Лусеген Арменакович, к.ф.-м.н.

lavakyan@rambler.ru

1. Постановка задачи

Цеолиты имеют широкое применение в качестве катализаторов и абсорбентов в промышленности. Координационное окружение атома Al, являющегося наиболее каталитически активным, как правило, неизвестно. Тогда как именно характер этого окружения определяет каталитические способности соединения.

Стандартные методы анализа структуры (в том числе и дифракционные) оказываются непригодными непосредственно в условиях катализа при изменяющихся внешних факторах, таких как температурный рост.

Наиболее эффективным методом для получения структурных параметров является метод Фурье-анализа рентгеновских спектров поглощения.

Na- и H- мордениты, рассматриваемые в этой работе, являются аморфными соединениями, для которых EXAFS осцилляции, как правило, не наблюдаются. Более того, происходит размывание первой координационной сферы, а следовательно, и первого максимума в XANES области спектра.

Ранее было показано, что первые максимумы в XANES области спектра исследуемых соединений формируются при существенном влиянии процессов многократного рассеяния и процессов рассеяния на второй и более далеких координационных сферах, тогда как более высокоэнергетическая область XANES спектра формируется, в основном, за счет рассеяния на первой координационной сфере. Этот результат позволяет выбрать интервал волновых чисел фотоэлектрона для Фурье преобразования так, чтобы исключить первые краевые особенности и учитывать только ближайшие атомы кислорода.

2. Решение

$\chi(k)$ функции для исследуемых цеолитов были извлечены из экспериментальных Al K-XANES спектров в рамках Хартри-Фоковского МТ потенциала. Для построения амплитуд рассеяния и фазовых сдвигов использованы электронные конфигурации $Al(1s^1 2s^2 3s^2 3p^6 4s^4 4p^1)$ для рассеивающего атома и $O(1s^2 2s^2 2p^4)$ для атомов кислородного окружения. Для доказательства применимости таких амплитуд и фаз для Фурье-анализа, метод был применен к соединениям с известной структурой: берлиниту и Na-мордениту. Все параметры Al-O пары (такие как энергетический сдвиг, длина свободного пробега, фактор Дебая-Валлера при комнатной температуре и др.) были зафиксированы на модельных соединениях.

Для описания температурного роста фактора Дебая-Валлера использовалось гармоническое приближение колебаний атомов. Фактор Дебая-Валлера, в таком приближении имеет следующий вид:

$$\sigma^2 = \frac{k_b}{k} \cdot T, \quad (1)$$

где k_b - постоянная Больцмана, а k – силовая постоянная ($U = k \cdot r^2/2$). То есть, зная σ^2 для комнатной температуры можно найти его и для другой интересующей нас температуры.

Эти результаты позволяют применить метод к H-морденитам при разных температурах. Фурье пик первой координационной сферы вокруг ионизированного атома Al в H-морденитах подгоняется:

а) односферной подгонкой, которая даёт средневзвешенное значение расстояния Al-O и суммарное число ближайших соседей;

б) двухсферной подгонкой, выполненной с использованием нескольких альтернативных моделей координационного окружения атома алюминия, сделанных для интерпретации асимметрии пика первой сферы.

3. Результат

Известно, что Na-морденит содержит только тетраэдрически координированный Al. H-морденит получается из Na-морденита в ходе ионного обмена атомов Na на группы NH_4 . При комнатных температурах поры в соединении заполнены водой. Было показано, что около 70% атомов Al имеют тетраэдрическую координацию, а присутствие воды приводит к появлению 30% гексагонально координированных атомов Al.

Последующее нагревание удаляет NH_3 группы оставляя ионы H^+ как заряд компенсирующие ионы. Атом кислорода, который связан с ионом H^+ , имеет удлиненное Al-O расстояние, приводящее к сокращению остальных трех. То есть имеет место расщепление координационной сферы на одно далекое ($\sim 1.9 \text{ \AA}$) и три близких ($\sim 1.7 \text{ \AA}$) расстояния для H-морденита при $300^\circ C$.

Для Н-морденита при 710 °С наблюдается смесь 3-х и 4-х координированных атомов Al. Причем координированная сфера соответствующая координационному числу 4 расщеплена на координационные сферы с координационными числами 1 и 3.

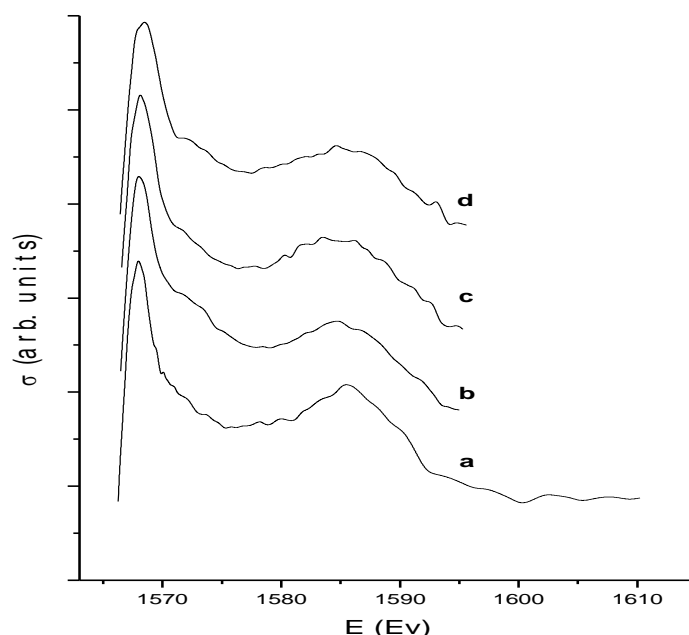


Рис. 1. Экспериментальные Al K-XANES спектры Морденитов: (a) Na-Морденита при 300 К и Н-Морденита при (b) 300 К, (c) 575 К, и (d) 985 К.

Численное моделирование процесса переноса распыленных атомов мишени в процессе получения твердых растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$

Алимагомедов Якуб Альбертович

Билалов Биалал Аругович

Дагестанский Государственный Университет

Рагимханов Гаджимирза Балагланович, к.ф.-м.н.

alimagomedov_yak@mail.ru

Как известно, процесс магнетронного осаждения пленок является многопараметрическим. Поэтому для оптимизации технологических параметров процесса магнетронного осаждения пленок твердых растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ были рассчитаны зависимости протяженности зоны термализации атомов мишени $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ от давления аргона при различных режимах распыления. Оценено оптимальное положение анода МРС, что позволит оптимизировать технологические параметры получения пленок $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ методом магнетронного распыления.

Для расчета протяженности зоны термализации был использован модель нелинейной диффузии, рассматривающая процесс переноса атомов как диффузию с сверхтепловой скоростью [1]. Данная модель позволяет определить границу зоны термализации в виде:

$$X = K_0 - K + \frac{\alpha^2 - 1}{2\alpha} \ln \left[\frac{(\alpha K_0 + 1)(\alpha K - 1)}{(\alpha K_0 - 1)(\alpha K + 1)} \right],$$

где $\alpha^2 = (v_m - v_i) / v_i$ - параметр, характеризующий степень рассеяния потока распыленных атомов ($\alpha \rightarrow 0$ - весь поток рассеивается, $\alpha \rightarrow \infty$ ни одно из столкновений не выводит частицы из потока); v_i - частота, с которой распыленные атомы покидают поток в результате соударений с атомами рабочего газа; v_i - полная частота соударений; $K_0 = V_0 / V_T$ - относительная начальная дрейфовая скорость распыленного атома; V_0 - начальная дрейфовая скорость распыленного атома; $V_T = (kT/m)^{1/2}$ - локальное значение тепловой скорости, т.е. скорости термализованного атома.

Полученная величина X выражена в терминах локальной длины свободного пробега $\lambda = \Lambda / \alpha$ в направлении движения:

$$x = \int \alpha / \Lambda dx,$$

$$\Lambda = V_T [(v_m - v_i) v_i]^{1/2}$$

В данной модели рассмотрены только упругие столкновения, так как величина средней энергии распыленных атомов при ионно-плазменном распылении, как правило, не превышает 10эВ [2].

Анализ полученных зависимостей, которым соответствуют термализация распыленных атомов вблизи катода, показывает, что при высоком давлении рабочего газа должны наблюдаться уменьшение радиационных дефектов и равномерность пленки на подложке, расположенной на расстояниях, значительно превышающих длину зоны термализации. В области низких давлений рабочего газа, ограниченных возможностью зажигания разряда с заданными параметрами, термализация распыленных атомов происходит на значительном удалении от мишени. Это приведет к неравномерности свойств пленки по поверхности, обусловленной значительным потоком нетермализованных распыленных атомов.

Результаты расчетов находятся в хорошо согласуются с результатами экспериментов.

Список публикаций:

[1] Вольяс В.А., Гольман Е.К., Цукерман М.А.. ЖТФ. В.4. Т.66. С.16-23. (1996).

[2] Sputering by Particle Bombardment. //Ind. R. Behrisch. Berlin, heidelbeg, New York: Springer-Verlag, P. 336 (1981).

Точное статическое решение в однородных координатах для жидкого шара

Бикмурзин Рустам Васильевич

Красноярский Государственный Университет

Баранов Александр Михайлович, д.ф.-м.н.

bam@lan.krasu.ru

В работе исследуется модель статического сферически симметричного гравитирующего жидкого шара с однородной плотностью и метрикой, записанной в однородных координатах:

$$ds^2 = R^2 [A_{in}(x) d\tau^2 - B_{in}(x) dl^2]. \quad (1)$$

Здесь выбраны безразмерные переменные: временная, $\tau = ct/R$, и пространственная, $x = r/R$; R – внешний радиус шара; $0 \leq x \leq 1$; t, r суть временная и радиальная размерные переменные соответственно; скорость света взята равной $c=1$; $\alpha=8\pi$; $A_{in}(x)$ и $B_{in}(x)$ суть метрические функции, а метрика плоского евклидова 3-пространства может быть записана в сферических координатах как: $dl^2 = dx^2 + x^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2)$. Тензор энергии-импульса выбирается в приближении идеальной паскалевой жидкости, где U_α – 4-скорость, μ – плотность жидкости, а p – давление):

$$T_{\alpha\beta} = (\mu + p) \cdot U_\alpha U_\beta - p g_{\alpha\beta}. \quad (2)$$

В сопутствующей системе отсчета 4-скорость равна $U_\alpha = \delta_\alpha^0 \sqrt{A_{in}(x)} R^2$.

Уравнения Эйнштейна сводятся к трем уравнениям на функции $A_{in}(x)$ и $B_{in}(x)$. При замене $B_{in}(x) = b(x)^4 / (2\pi\mu R^2)$, одно из уравнений Эйнштейна может быть переписано как уравнение Эмдена-Фаулера:

$$\frac{d^2 b(x)}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{db(x)}{dx} + b^5(x) = 0. \quad (3)$$

Решение этого уравнения и другого уравнения Эйнштейна на функцию $A_{in}(x)$ записываются как:

$$B_{in}(x) = \frac{1}{2\pi\mu R^2} \frac{9C_0^2}{(x^2 + 3C_0^2)^2}; \quad A_{in}(x) = \left(C_2 - \frac{C_1}{2(x^2 + 3C_0^2)} \right)^2. \quad (4)$$

Чтобы получить полное решение, произведем на поверхности шара гладкую сшивку метрических функций внутреннего решения (4) с соответствующими метрическими функциями внешнего решения Шварцшильда в однородных координатах:

$$A_{out} = \left(\frac{1 - C/r}{1 + C/r} \right)^2 = \left(\frac{1 - \eta/4x}{1 + \eta/4x} \right)^2; \quad B_{out} = \left(1 + \frac{C}{r} \right)^4 = \left(1 + \frac{\eta}{4x} \right)^4. \quad (5)$$

где $\eta = 2m/R$ – компактность, m – интегральная масса Шварцшильда.

Из сшивки легко находятся постоянные интегрирования: $C_0 = 2/\sqrt{3\eta}$; $C_1 = 8/\eta$; $C_2 = (8 - \eta)/(4 + \eta)$. Тогда решение для внутренней области гравитирующего шара переписывается в виде:

$$A_{in}(x) = \left(\frac{8 - \eta}{4 + \eta} - \frac{\sqrt{B_{in}(x)}}{(1 + \eta/4)} \right)^2; \quad B_{in}(x) = \frac{6\eta}{\pi\mu R^2 (x^2\eta + 4)^2} = \frac{(1 + \eta/4)^6}{(1 + x^2\eta/4)^2}. \quad (6)$$

где μ теперь выражается через параметры задачи как: $\mu = \frac{1536\eta}{\pi R^2 (4 + \eta)^6} = \frac{3\eta}{8\pi R^2} \left(1 + \frac{\eta}{4} \right)^{-6}$.

Из уравнений Эйнштейна можно найти функцию давления $p(x)$:

$$p(x) = \frac{1 - x^2}{1 + \eta/4} \sqrt{\left(\frac{\mu^3 R^2 \pi \eta}{6} \right) \frac{B_{in}(x)}{A_{in}(x)}}. \quad (7)$$

Отметим, что скалярная кривизна, с одной стороны, равна $R_s = 8\pi R^2 (\mu - 3p(x))$, а с другой может быть преобразована к виду:

$$R_s = \frac{3\eta(x^2\eta^2 - 20x^2\eta + 20\eta - 16)}{(x^2\eta^2 - 8x^2\eta + 8\eta - 16)(1 + \eta/4)^6}. \quad (8)$$

Преобразование Мутара в трех измерениях

Верещагин Михаил Дмитриевич

Калининградский Государственный Университет

Юров Артем Валерьянович, к.ф.-м.н.

ver_mishel@mail.ru

Уравнение Шредингера без преувеличения является краеугольным камнем квантовой механики. Однако, как и большинство уравнений математической физики, мы не можем решить его в общем случае, а знаем лишь несколько решений для конкретных потенциалов. В свете этого большую популярность завоевали методы, позволяющие по уже известным решениям построить новые для измененного потенциала. Одним из таких методов является преобразование Мутара (которое применимо также и к некоторым другим уравнениям математической физики). К сожалению, в отличие от преобразования Дарбу оно работает только в одном или двух измерениях. Пытаясь обобщить его на большее количество измерений, мы сталкиваемся с проблемами, которые сами собой благополучно решаются при меньшем количестве измерений, однако в данном случае приводят к невозможности его осуществления обычным путем. В данной работе представлен путь, который позволяет осуществить его в трех измерениях. Это достигается путем введения в задачу магнитного поля. И оказывается, что в этом случае, если это поле типа Аронова-Бома и удовлетворяет еще одному условию (а такие поля можно построить как показано ниже), этот прием позволяет преодолеть проблемы, возникающие в трех измерениях. Дополнительное условие, которое накладывается на магнитное поле имеет довольно сложный вид, и, по-видимому, не допускает аналитического решения, однако, как показано в работе, в ряде частных случаев оно может быть решено, тем самым позволяя действительно построить преобразование Мутара в трех измерениях.

Если есть 2 различных решения уравнения Шредингера в трех измерениях φ и ψ для гамильтониана H с нулевым собственным значением, который может быть факторизован следующим образом: $H = q_m^+ q_m$, где $q_m = \partial_m + i\kappa_m + \partial_m \chi$, $\chi = -\ln \varphi$, κ_m - векторный потенциал, то можно построить решение для так называемого «одетого» гамильтониана $\tilde{H} = q_m q_m^+$:

$$\tilde{\psi} = \frac{e^{-p}}{\varphi} \left(2 \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} (\vec{\nabla}(e^p \psi), \vec{\nabla} \varphi, d\vec{r}) + A \right) \quad (1)$$

где $H\varphi=0$ и $H\psi=0$, $\vec{k} = -i\vec{\nabla}p$ (мы можем это сделать, так как рассматриваем только поля типа Аронова-Бома, для которых $rot\vec{B}=0$). Однако на поле необходимо наложить еще одно дополнительное условие:

$$rot[\vec{\nabla}(e^p \psi) \times \vec{\nabla} \varphi] = 0 \quad (2)$$

Это условие слишком сложно для решения относительно магнитного поля в общем случае. Однако в работе рассмотрены частные случаи, когда это возможно. В частности, если положить в итоговой формуле, что магнитное поле отсутствует или взять два одинаковых решения в качестве пробных функций, мы получим хорошо известное (единственное известное) преобразование вида: $\tilde{\psi} = \frac{Const}{\varphi}$.

О модели заряженного астрофизического объекта

Власов Захар Владимирович

Красноярский Государственный Университет

Баранов Александр Михайлович, д.ф.м.н.

raven_z@freemail.ru

Проблема нахождения точных решений уравнений Эйнштейна в рамках Общей теории относительности не теряет актуальности, по сей день. Особый интерес, несмотря на некоторую экзотичность, представляют модели электрически заряженных звезд, поскольку электрический заряд одна из величин не исчезающая при коллапсе звезды.

Основные трудности расчета подобных моделей заключены в нелинейности системы уравнений Эйнштейна, их недостаточности для описания системы; как следствие, необходимости связывания оных с уравнениями Максвелла.

В данной работе рассматривается модель статической сферически симметричной звезды. Астрофизический объект имеет некоторое распределение нейтрального вещества в виде идеальной паскалевой жидкости и распределение электрического заряда, "растворенного" в этой жидкости. При этом внешнее решение должно удовлетворять решению Райснера-Нордстрема, как обобщению решения Шварцшильда, для заряженного сферически-симметричного тела. Предполагается, что модель статическая, и рассматривается без вращения и излучения.

Выберем метрический интервал в радиационных координатах Бонди:

$$ds^2 = F(r)dt^2 + 2L(r)dtdr - r^2(d\Theta^2 + \sin^2(\Theta)d\varphi^2).$$

Метрические коэффициенты $G=G(r)$, и $L=L(r)$ суть функции радиальной переменной r , t – временная координата, Θ и φ - угловые переменные, скорость света $c=1$ и ньютоновская гравитационная постоянная $G_N=1$. Результирующий тензор энергии-импульса материи берется как прямая сумма тензора энергии $T_{(\alpha)(\beta)}$ импульса идеальной паскалевой жидкости, нейтральной материи и тензора энергии-импульса электромагнитного поля

$$T_{(\alpha)(\beta)} = T_{(\alpha)(\beta)}^{fluid} + T_{(\alpha)(\beta)}^{elmag}.$$

Система с учетом сферической симметрии задачи эквивалентна четырем уравнениям Эйнштейна.

Из полученной системы гравитационных уравнений можно получить решение для заряженной жидкости, дополнив систему уравнениями Максвелла.

$$\left(\frac{x^2 E}{L} \right)'_x = 4\pi R \rho \frac{x^2}{\sqrt{\varepsilon(x)}}.$$

Путем исключения плотности массы-энергии и давления система уравнений сводится к линейному дифференциальному уравнению с переменными коэффициентами на функцию $G(x)$ ($F = G^2$), которое с помощью замены:

$$d\zeta = \frac{xdx}{\sqrt{\varepsilon(x)}}$$

приводится к уравнению нелинейного пространственного осциллятора:

$$G_{\zeta\zeta}'' + \Omega^2(\zeta(x))G = 0.$$

Выберем плотность энергии электрического поля с явной зависимостью от x^2 в виде: $W_{el} = \frac{1}{8\pi} \lambda^2(x)x^2$ где $\lambda^2 = \lambda^2(x)$ – произвольная мультипликативная функция, плотность массы-энергии: $\mu(x) = \mu_0(1 - bx^2)^3$, а плотность электрического заряда: $\rho = \rho^* \sqrt{\varepsilon(x)} = \rho_0(1 - ax^2)\sqrt{\varepsilon(x)}$.

Связав коэффициенты a и b условием: $a = \frac{80}{63}b$, приходим к $\Omega^2 = \Omega_0^2 = const$, что соответствует точному решению уравнений Эйнштейна, где $G(\zeta) = G_0 \cos(\Omega_0 \zeta(x) + \alpha_0)$, где α_0 - сдвиг начальной фазы.

В дальнейшем производим классификацию полученного точного решения согласно алгебраической классификации пространств Петрова. Для этого исследуем структуру тензора конформной кривизны. Тензор кривизны (тензор Вейля) проектируется в заданной 4-точке с помощью ортонормированного базиса на касательное плоское пространство, затем отображается на бивекторное метризованное пространство. В результате тип исследуемого пространства определяется исходя из характеристики матрицы

$$R_{AB} - \lambda g_{AB},$$

где $A, B, C = 1, 2, 3, 4, 5, 6$; и $R_{AB} = R_{BA}$; $g_{AB} = g_{BA}$.

Полученный набор собственных значений матрицы: $\lambda_1 \neq \lambda_2 = \lambda_3$ - соответствует типу D согласно алгебраической классификации Петрова.

Асимптотические формулы для сечений неупругих процессов при столкновениях релятивистских голых тяжёлых ионов с атомами

Гусаревич Евгений Степанович

Поморский Государственный Университет

Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.

gusarevich.eugeniy@pomorsu.ru

Изучение столкновений релятивистских тяжёлых ионов (РТИ) с атомами является одним из тех направлений современной физики, исследования в которых в настоящее время интенсивно ведутся по всему миру. Большой интерес, проявляемый к изучению столкновений с атомами РТИ, обусловлен, во-первых, тем, что при столкновениях с атомами тяжёлых (особенно голых) ионов оказывается, что эффективные напряжённости полей, создаваемых такими многозарядными ионами, значительно превосходят электрические поля, получаемые в лабораторных условиях. Поэтому столкновительные эксперименты с участием РТИ представляют собой уникальную возможность изучения поведения атомов и молекул в сверхсильных электромагнитных полях. Во-вторых, РТИ являются уникальным инструментом для изучения внутреннего строения многоэлектронных атомов и исследования межэлектронного взаимодействия в них. Важно отметить и практическую значимость РТИ, которые могут использоваться при исследовании процессов имплантации и распыления твёрдых тел при ионной бомбардировке, для диагностики и спектроскопии плазмы, накачки активных сред мощных лазеров и т.д..

В связи с отмеченной выше фундаментальной и прикладной значимостью изучения столкновений РТИ с веществом актуальной становится задача проведения оценки или расчёта характерных физических величин (сечений), описывающих исследуемые процессы. Потребность в таких расчётах возникает на всех стадиях экспериментального исследования – планирования, технического обеспечения, проведения измерений, обработки и интерпретации экспериментальных данных, особенно при проведении таких технически сложных исследований, как изучение столкновений РТИ с атомами и молекулами.

При изучении атомных столкновений в своё время огромную роль сыграли, так называемые, асимптотические формулы Бете для сечений неупругих процессов и потерь энергии при столкновениях быстрых заряженных частиц с атомами. Параметры, входящие в эти формулы либо рассчитывались, либо брались из эксперимента. Именно простота записи и интерпретации, и обеспечила исключительно широкую

область применимости формул Бете. Основой для получения асимптотики Бете является теория возмущений, применимая при $Z/v \ll 1$, где Z – заряд налетающей частицы, v – относительная скорость столкновения (атомные единицы). Однако для полей, создаваемых достаточно большими зарядами, теория возмущений неприменима даже при сколь угодно больших энергиях столкновения, что вызывает необходимость описывать процессы в таких полях непertурбативными методами. Последнее обстоятельство значительно усложняет расчёты и делает не очевидной возможность получения простых формул для сечений неупругих процессов.

В данной работе, посвящённой изучению неупругих процессов, происходящих при столкновениях релятивистских голых тяжёлых ионов (РГТИ) с атомами, представлен новый непertурбативный метод, позволяющий получить для сечений таких процессов набор простых, полностью аналитических формул, аналогичных формулам Бете, асимптотических по заряду $Z \gg 1$ иона и скорости столкновения $v \rightarrow c$ (c – скорость света). В работе рассмотрены столкновения РГТИ с водородоподобными атомами, приводящие к возбуждению атомов мишени в состояния дискретного и непрерывного спектра. Для вышеуказанных процессов получены простые формулы для оценки и расчёта сечений. Кроме того, в работе получены аналогичные асимптотические выражения для сечений однократного и двукратного возбуждения и ионизации гелиеподобных атомов, вызванных столкновением с РГТИ.

Основу развитой нами расчётной методики составляет релятивистское обобщение приближения эйконала и метод сшивки [1]. Продемонстрируем её применение для расчёта сечения перехода нерелятивистского (до и после столкновения) водородоподобного атома с зарядом ядра Z_a из основного состояния с энергией ε_1 в состояние дискретного спектра с главным квантовым числом n и энергией ε_n , вызванного столкновением с РГТИ. В этом случае, сечение (просуммированное по всевозможным для данного n значениям момента l и его проекции m) можно представить в виде

$$\sigma_n = 8\pi \frac{Z^2}{v^2 Z_a^2} \lambda_n \left(\ln \frac{2\alpha_n v^2 Z_a \gamma}{\eta Z \Omega_n} - \frac{\beta^2}{2} \right),$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v/c$, $\Omega_n = \varepsilon_n - \varepsilon_1$, $\varepsilon_1 = -Z_a^2/2$, $\varepsilon_n = -Z_a^2/(2n^2)$, а величины λ_n и α_n могут быть рассчитаны, используя данные о неупругих формфакторах атома водорода:

$$\lambda_n = \frac{256}{3} \frac{n^7}{(n^2-1)^5} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^{2n}.$$

При $n = 2$:

$$\alpha_2 = \frac{3}{4} \exp \left\{ -\frac{25}{24} \right\}.$$

При $n > 2$:

$$\alpha_n = \frac{n+1}{2n} \exp \left\{ -\frac{n-1}{256 n^6 (n+1)(n-2)} \left[A_n + \left(\frac{n+1}{n-1} \right)^{2n-3} B_n \right] + C_n \right\},$$

где $A_n = 11n^7 + 320n^6 + 97n^5 - 22n^4 - 3n^3 - 4n^2 - 9n - 6$, $B_n = 41n^7 - 74n^6 - 79n^5 - 226n^4 - 237n^3 - 142n^2 - 45n - 6$, $C_n = [G_n([(n+1)/(n-1)]^2) - G_n(1)]/2$. Здесь $G_n(z) = \sum_{m=1}^{n-3} z^m/m$, причём предполагается, что при $n = 3$ сумма обращается в нуль.

Автор благодарит РФФИ (грант 04-02-16177-а) и Фонд INTAS-GSI (проект 03-54-4294) за финансовую поддержку работы.

Список публикаций:

[1] Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю., ЖЭТФ, **114**, 1646-1661 (1998).

Немарковость, случайность и эргодичность в сложных системах биологической природы на примере болезни Паркинсона

Дёмин Сергей Анатольевич

Панищев Олег Юрьевич

Казанский Государственный Педагогический Университет

Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.

sergey@theory.kazan-spu.ru

В последнее время большое внимание уделяется поиску новых, альтернативных методов диагностики, лечения и профилактики тяжелых заболеваний центральной нервной системы и опорно-двигательного аппарата. При этом одним из самых серьезных заболеваний для человека является болезнь Паркинсона. Существующие методы лечения сводятся к трем основным направлениям: медикаментозное лечение, хирургическое лечение и электромагнитная стимуляция соответствующей области коры головного мозга. Однако не всегда используемые дорогостоящие медицинские методы приводят к положительному результату. Современные методы биофизики, биохимии и нейрофизиологии позволяют получить более действенные средства лечения болезни Паркинсона. Они дополняют и качественно обновляют процесс лечения больного человека.

Мы предлагаем использовать новый метод диагностики болезни Паркинсона на основе статистического анализа экспериментальных данных. На основе учета дискретности экспериментальных данных, эффектов статистической памяти, конструктивной роли флуктуаций и корреляций мы получаем информацию об отдельных свойствах и параметрах исследуемой живой системы. В частности используемая нами статистическая теория дискретных немарковских случайных процессов [1,2] позволяет выявить и оценить Марковские и немарковские компоненты исходного временного сигнала, эффекты случайности и регулярности, а, следовательно, эффекты эргодичности. Для отражения этих эффектов мы используем временные зависимости ортогональных динамических переменных, спектры мощности исходной временной корреляционной функции и функций памяти младшего порядка, локальные кинетические и релаксационные параметры, частотную зависимость параметра немарковости - ε . Данный параметр позволяет разделить все стохастические процессы на Марковские (случайные) $\varepsilon \gg 1$, квазимарковские $\varepsilon > 1$ и немарковские $\varepsilon \sim 1$. Наиболее полную информацию при этом имеет значение первой точки параметра немарковости на нулевой частоте $\varepsilon_1(0)$. Данная точка накапливает информацию о всех динамических особенностях исходного временного сигнала. Увеличение этого значения говорит о усилении Марковских (случайных) эффектов и слабых корреляциях в исходных временных сигналах, проявлении эффектов коротковременной или мгновенной памяти. Сопоставительный анализ различных динамических состояний сложных систем биологической природы [2,3,4] позволил нам отметить следующую закономерность. Для нормальных физиологических состояний живой системы значения этого параметра максимальны и достигают $\varepsilon_1(0) \sim 10^2$. Уменьшение данного параметра отражает усиление немарковских эффектов и эффектов регулярности, сильных корреляций в исходных временных сериях, проявлении эффектов долговременной, дальнедействующей памяти. Любое событие, происходящее в системе, определяется предшествующими событиями. Уменьшение данного параметра отражает ухудшение физиологического состояния живой системы. Патологические состояния живой системы характеризуются минимальными значениями $\varepsilon_1(0) \sim 10^0$. Таким образом, любое заболевание в живой системе является внешней силой, для подавления которой происходит стабилизация (урегулирование) процессов, протекающих в системе.

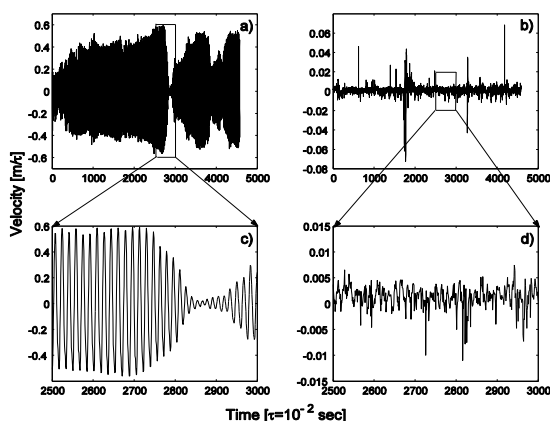


рис. 1

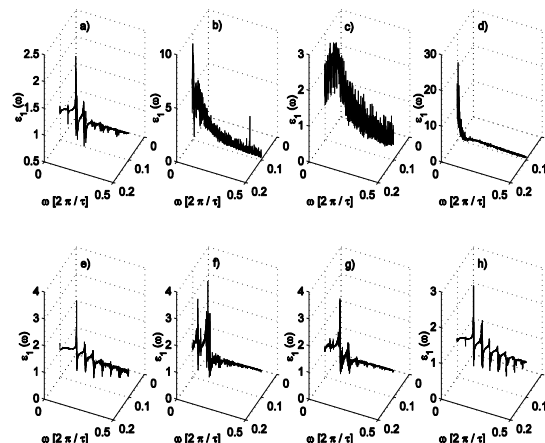


рис. 2

В качестве экспериментальных данных мы использовали временные записи скорости патологического тремора указательного пальца пациента с диагнозом болезнь Паркинсона [5]. В научном исследовании

участвовало 16 человек. Регистрация временных записей осуществлялась при 8 условиях: а) естественном состоянии пациента, б) при воздействии на организм пациента медикаментами (L-Dopa) и электромагнитной стимуляцией, в) при воздействии только медикаментами, г) при воздействии только электромагнитным стимулятором, д,е,ж,з) через 15 (30, 45, 60) минут после отключения электромагнитного стимулятора, лекарства не применяются.

На *рис. 1* представлены исходные временные серии скорости тремора для двух состояний одного из пациентов: естественное состояние (*рис. 1a*) и состояние после воздействия на организм пациента медикаментами и электромагнитной стимуляцией (*рис. 1b*). В данных временных сериях мы указали локальные участки по 500 точек (*рис. 1c,d*). В естественном состоянии пациента исходный временной сигнал имеет периодическую структуру. Такая периодическая динамика исходного временного сигнала связана с патологическим тремором конечностей больного человека. Совершенно иная картина характерна для любого из способов лечения. Периодичность (регулярная структура) исходного сигнала сменяется случайностью. Таким образом, происходит смена периодических и регулярных режимов в случае патологического состояния человека к случайным динамическим режимам для нормального физиологического состояния.

Периодическая структура скорости патологического тремора отражается и в частотной зависимости первой точки параметра немарковости $\epsilon_1(\omega)$ (*рис. 2*) для 8 условий регистрации временных серий. Осцилляции происходят с характерной частотой $\omega \sim 0.06 f.u.$ Наиболее отчетливо осцилляции выражены в области низких частот (*рис. 2a, e-h*). Данная структура полностью подавляется при медицинском воздействии на организм больного человека (*рис. 2 b-d*). К нарушению периодической картины приводит быстрая смена различных динамических режимов (динамическая перемежаемость) и усиление эффектов случайности. Это связано с уменьшением, а в некотором случае с полным подавлением патологического тремора. Значение первой точки параметра немарковости на нулевой частоте $\epsilon_1(0)$ определяет наиболее эффективный способ лечения, как для отдельного индивидуального случая, так и в среднем по группе.

Настоящая работа поддержана фондами: МО РФ № 02-3.1-538, РГНФ № 03-06-00218а, РФФИ № 02-02-16146.

Список публикаций:

- [1] R.M. Yulmetyev, P. Hänggi and F.M. Gafarov, *Phys. Rev. E*, **62**(5), 6178 (2000).
- [2] R.M. Yulmetyev, P. Hänggi and F.M. Gafarov, *Phys. Rev. E*, **65**, 046107 (2002).
- [3] R.M. Yulmetyev, S.A. Demin, N.A. Emelyanova, F.M. Gafarov and P. Hänggi, *Physica A*, **319**, 432 (2003).
- [4] R.M. Yulmetyev, N.A. Emelyanova, S.A. Demin, F.M. Gafarov, P. Hänggi, D.G. Yulmetyeva, *Physica A*, **331**, 300 (2004).
- [5] A. Beuter, M. Titcombe, F. Richer, Ch. Gross and D. Guehl, *Thalamus&Related Systems*, **1**, 203 (2001).

Немарковость, скорость релаксации и эффекты статистической памяти в вариабельности сердечного ритма

Дёмин Сергей Анатольевич

Панищев Олег Юрьевич

Казанский Государственный Педагогический Университет

Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.

sergey@theory.kazan-spu.ru

Одной из наиболее значимых для человеческого организма систем жизнедеятельности является сердечно-сосудистая система (ССС). Состояние СССР в кардиологии, как правило, оценивается с помощью различных показателей, среди которых наиболее часто используемым является вариабельность сердечного ритма (ВСР). В настоящее время большое внимание уделяется проблемам старения СССР. При этом к подобным исследованиям привлекаются не только физиологи, биологи и медики, но и специалисты из других естественнонаучных областей человеческого знания.

В данной работе мы предлагаем новый метод исследования проблем старения СССР, основанный на статистической теории дискретных немарковских случайных процессов [1,2]. Эта теория уже нашла свое приложение в кардиологии [2], нейрофизиологии [3], исследовании сенсомоторной и локомоторной деятельности человека [4], эпидемиологии [5]. В частности данная теория позволяет выявить Марковские и немарковские особенности исходного временного сигнала, эффекты дальнедействующей и короткодействующей памяти, оценивать скорость релаксации различных динамических режимов. Здесь мы отражаем лишь некоторые возрастные особенности вариабельности сердечного ритма, связанные с дыхательной аритмией и скоростью релаксации физиологических процессов.

В качестве экспериментальных данных мы использовали временные записи динамики RR-интервалов для двух возрастных групп здоровых людей. Первая группа – молодые люди (21 - 34 года, средний возраст 27 лет), вторая группа – пожилые люди (68 - 81 год, средний возраст 74 года). В каждой группе по 10 человек: 5 мужчин и 5 женщин [6].

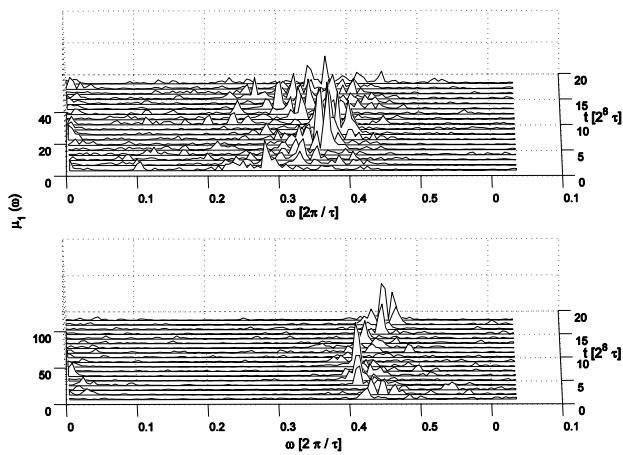


рис.1

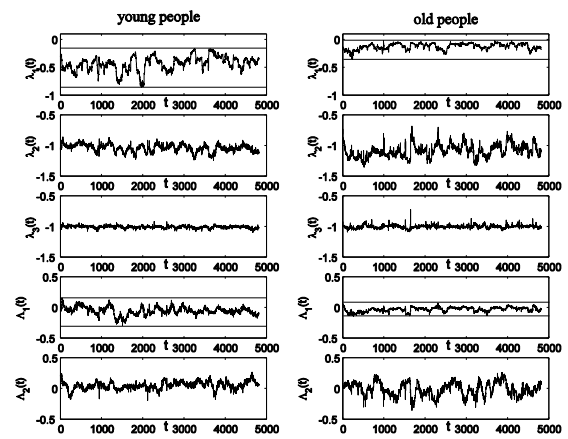


рис.2

На рис.1 представлено оконно-временное поведение первой функции памяти $\mu_1(\omega)$ для одного молодого (верхний график рис.1) и одного пожилого (нижний график рис.1) людей. В обоих спектрах мощности наиболее заметны динамические всплески, связанные с дыхательной аритмией. Все они приходятся на определенную область частот. Для молодых людей область данных динамических пиков соответствует $0.25f.u. < \omega < 0.45 f.u.$ У пожилых людей эта область сдвигается вправо и соответствует частотной области $0.4f.u. < \omega < 0.55 f.u.$ Это говорит об увеличении числа сердечных сокращений при дыхании с возрастом.

Локальные кинетические и релаксационные параметры, вычисляемые с помощью нашей методики, позволяют оценивать скорость релаксации, а процедура локализации дает возможность выявить внутренние особенности динамики сердечной деятельности, скрытые для обычного корреляционного анализа. Суть процедуры локализации состоит в следующем: из имеющегося временного ряда берется выборка длиной N точек, для которой вычисляются кинетические и релаксационные параметры. Затем выполняется операция «пошагового сдвига вправо» на один интервал, после чего снова вычисляются кинетические и релаксационные параметры. Эта процедура выполняется до конца временной серии. Полученные таким образом локальные релаксационные параметры обладают высокой чувствительностью к эффектам перемежаемости и нестационарности. Если в исходной временной серии имеется какая-либо нерегулярность, то это моментально отражается в поведении локальных параметров. При использовании данного метода необходимо определить оптимальную длину выборки, которая позволяет получить наиболее достоверную информацию. В результате исследования разных длин локальной выборки нами была получена оптимальная длина, которая составляет $2^7=128$ точек.

На рис.2 представлены усредненные по группе временные зависимости локальных кинетических и релаксационных параметров λ_i , $i=1..3$, и Λ_1 , Λ_2 для молодых и старых людей. Физический смысл первого релаксационного параметра λ_1 заключается в определении скорости релаксации исследуемого процесса. Амплитуда параметра λ_1 у молодых людей в среднем по группе изменяется в интервале $0.172\tau^{-1} < \lambda_1 < 0.852 \tau^{-1}$. У пожилых людей этот показатель изменяется в пределах $0.018\tau^{-1} < \lambda_1 < 0.36 \tau^{-1}$. Сравнение данных интервалов говорит о снижении скорости релаксации с возрастом. Процессы, протекающие в сердце молодых людей, обладают большей скоростью релаксации. Следовательно, при наличии каких-либо отклонений в работе сердца, происходит более быстрое восстановление его нормального режима работы. Скорость релаксации сердечной деятельности пожилых людей уменьшается, это означает, что работа сердца медленнее возвращается к своему нормальному ритму.

Настоящая работа поддержана фондами: МО РФ № Е 02-3.1-538, РГНФ № 03-06-00218а, РФФИ № 02-02-16146.

Список публикаций:

- [1]. R.M. Yulmetyev, F. Gafarov, P. Hänggi, R.R Nigmatullin and Sh. Kayumov, *Phys. Rev. E*, **64**, 066132 (2001).
- [2]. R.M. Yulmetyev, P. Hänggi and F. Gafarov, *Phys. Rev. E*, **65**, 046107 (2002).
- [3]. R.M. Yulmetyev, P. Hänggi and F. Gafarov, *JETP*, **123**(3), 643 (2003).
- [4]. R. Yulmetyev, S. Demin, N. Emelyanova, F. Gafarov and P. Hänggi, *Physica A*, **319**, 432 (2003).
- [5]. R.M. Yulmetyev, N.A. Emelyanova, S.A. Demin, F.M. Gafarov, P. Hänggi and D. G. Yulmetyeva, *Physica A*, **331**, 330 (2004).
- [6]. N. Iyengar, C.-K. Peng, R. Morin, A.L. Goldberger and L.A. Lipsitz, *Am. J. Physiol.*, **271**, 1078 (1996).

Буши колебательных мод в нелинейных цепочках Ферми-Пасты-Улама с точечными дефектами

Жуков Константин Геннадьевич

Костенко Александр Владимирович

Ростовский Государственный Университет

Чечин Георгий Михайлович, к. ф.-м. н.

kgz@inbox.ru

В настоящее время одним из актуальных вопросов современной физики является исследование различных нелинейных динамических режимов в одномерных периодических структурах. Наряду с такими широко известными режимами как солитоны, дискретные бризеры и т.д., в работах [1,2] был открыт некоторый новый тип *точных* динамических режимов, которые получили название буши нормальных мод. Бушем называется особый динамический режим, возникающий при задании начальных условий, симметрия которых определяется *подгруппой* группы симметрии G_0 рассматриваемой системы в состоянии равновесия. При этом в процесс колебаний оказываются вовлеченными не все нормальные моды, а обычно только весьма ограниченный их набор, сохраняющийся с течением времени. Эти наборы мод, называемые бушами, могут быть найдены при помощи теоретико-групповых методов, описанных в работах [1-5]. В математическом смысле буши мод представляют собой инвариантные многообразия, разложенные по базисным векторам неприводимых представлений группы G_0 . Инвариантные многообразия для частного случая моноатомных цепочек с помощью различных методов рассматривались в работах [3-8].

По определению буши мод являются колебательными режимами в нелинейных динамических системах с точной симметрией. Изучаемые нами атомные цепочки можно рассматривать как идеальную модель одномерного кристалла, обладающего строгой трансляционной симметрией. Однако в реальных кристаллах обычно присутствуют различные дефекты. В связи с этим возникает принципиальный вопрос: могут ли существовать буши мод или некоторые аналогичные им динамические объекты в системах с относительно небольшим количеством точечных дефектов. В настоящей работе показано, что несмотря на то, что в цепочке с дефектами буши мод как точные динамические режимы не могут существовать в силу потери ею трансляционной симметрии, в ней могут наблюдаться некоторые долгоживущие динамические объекты, состоящие из “пакетов” мод, которые локализованы вблизи мод соответствующего буша для аналогичной цепочки при отсутствии дефектов. В проводимых вычислительных экспериментах мы определенным образом моделируем в цепочках Ферми-Пасты-Улама наличие точечных дефектов двух видов – вакансий и примесей.

Согласно общей теории [1,2] для существования в атомной цепочке буша с заданной трансляционной симметрией необходимо, чтобы кратность увеличения размера элементарной ячейки в колебательном состоянии была делителем числа атомов цепочки N . Для моделирования наличия одной вакансии в атомной цепочке можно просто рассматривать “урезанную” цепочку из $N-1$ атома, сохраняя классификацию мод, определяемую полной цепочкой из N атомов. При этом мы возбуждаем в такой урезанной цепочке только моды, отвечающие некоторому определенному бушу, существование которого гарантировано симметрией полной атомной цепочки. В результате, как показывает вычислительный эксперимент, возникает некоторый сложный динамический режим, в котором основную роль играют моды, входящие в исходный буш. При этом их динамика существенно не отличается от динамики рассматриваемого буша в полной цепочке. Однако вокруг этих мод возникают своеобразные пакеты, огибающая которых периодическим образом эволюционирует во времени.

На *рис.1* представлена форма этих огибающих для буша $V[a^8, a^5i]$ (обозначения см. в [4,5]) в цепочке FPU- α с $N=1023$ атомами. По оси абсцисс отложено волновое число k соответствующих мод, а по оси ординат – огибающая их амплитуд. На выделенных фрагментах (*рис.1*) в три различных момента времени в увеличенном виде показана эволюция пакета, соответствующего корневой (главной) моде рассматриваемого буша. Из этих фрагментов видно изменение высоты, полуширины и формы этого пакета. Такой процесс эволюции пакетов повторяется периодически, и тенденции к его разрушению со временем обнаружено не было. На основании этого можно говорить о том, что в рассматриваемой системе существуют некоторые динамические режимы, которые можно называть “пакетными” бушами. В этих режимах, в отличие от обычных бушей, энергия колебаний не сосредоточена лишь в модах, входящих в буш, но локализована в ограниченном “пакете” мод, причем так, что основной вклад дают именно моды данного буша.

При рассмотрении дефектов типа примесей мы моделируем цепочку с одним или несколькими атомами, массы которых отличны от масс остальных атомов. Такая модель, очевидно, не обладает симметрией, и, следовательно, в ней невозможно существование бушей мод как точных решений. В процессе компьютерного моделирования и в этом случае, мы задаем начальные условия, соответствующие бушам в цепочке без дефектов. Как и ранее наблюдается возникновение пакетов около мод, входящих в буш, и, кроме того, возникновение сопряженных им мод.

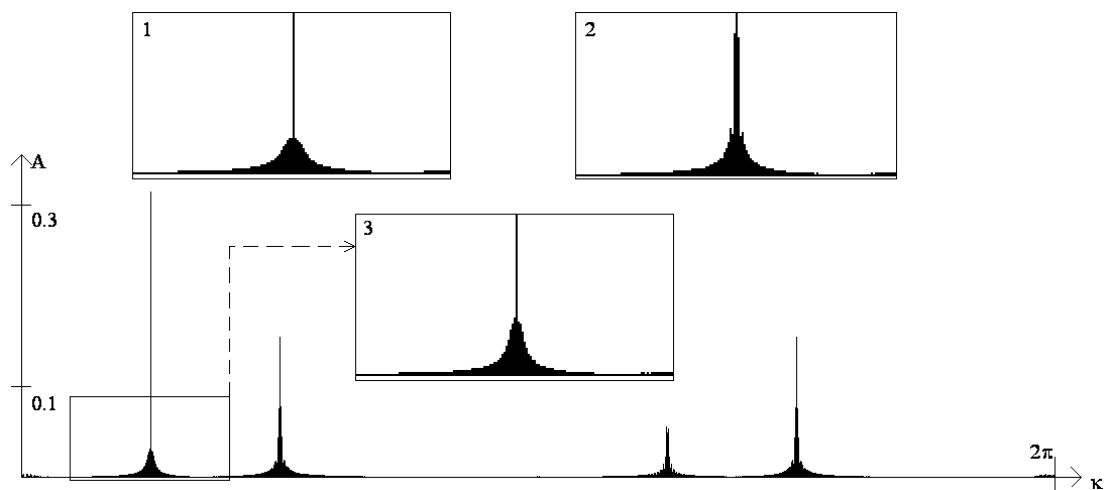


рис. 1

В отличие от случая цепочек с одной вакансией, где не удается заметить распад пакетного буша вплоть до времен порядка 50000 периодов T_0 самой длинноволновой моды этого буша, при моделировании цепочки с примесями уже на относительно малых временах (порядка сотен T_0) наблюдается модуляционная неустойчивость, которая проявляется в существенном росте амплитуд некоторого числа мод с $k \approx 0$. Таким образом, в этом случае мы можем говорить о возникающих динамических режимах лишь как о некоторых долгоживущих колебательных состояниях.

Таким образом, на примере цепочек Ферми-Пасты-Улама показано, что при наличии дефектов в системе могут существовать, по крайней мере, достаточно долгоживущие динамические режимы, являющиеся аналогами бушей мод. Нахождение этих режимов и установление условий их существования является необходимым при решении проблемы существования бушей мод в реальных физических объектах. Полученные результаты свидетельствуют о том, что буши мод могут существовать в системах с дефектами в виде “пакетных” бушей.

Список публикаций:

- [1] В. П. Сахненко, Г. М. Чечин, ДАН 330, 308 (1993); В. П. Сахненко, Г. М. Чечин, ДАН 338, 42 (1994).
- [2] G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko, Physica D 117, 43 (1998).
- [3] G. M. Chechin, N. V. Novikova, A. A. Abramenko, Physica D 166, 208 (2002).
- [4] К. Г. Жуков, Д. С. Рябов, Г. М. Чечин, Электронный журнал «Исследовано в России», 137(2003), 1616-1644, <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2003/137.pdf>; 161(2003), 1945-1964, <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2003/161.pdf>.
- [5] G. M. Chechin, D. S. Ryabov, K. G. Zhukov, Physica D, in press.
- [6] P. Poggi, S. Ruffo, Physica D 103 (1997) 251.
- [7] B. Rink, Physica D 175 (2003) 31.
- [8] S. Shinohara, J. Phys. Soc. Jpn. 71 (2002), 1802.

Особенности черенковского излучения в нелинейной среде

Земскова Светлана Геннадьевна

Тульский Государственный Университет

Колмаков Юрий Николаевич, к.ф.-м.н.

zemskova_s_g@rambler.ru

Известно, что заряженная частица, движущаяся со скоростью v , превышающей скорость света $v_{ЭМ}$ в изотропной линейной среде, испускает черенковское излучение, распространяющееся в виде конуса с углом раствора

$$2\theta = 2\arccos(v_{ЭМ}/v) . \quad (1)$$

Интересно рассмотреть этот эффект в нелинейной среде. Для этого запишем известную систему уравнений Максвелла для фурье-компонент полей \vec{E}, \vec{H} , созданных частицей с зарядом q :

$$\begin{aligned} [\vec{k}, \vec{E}] &= 4\pi k \omega \vec{H} / c^2, \\ \vec{k} \vec{E} / 4\pi k + \vec{k} \vec{P} &= -i2\pi q \delta(\omega - \vec{k} \vec{v}), \\ \vec{k} \vec{H} &= 0, \\ [\vec{k}, \vec{H}] &= -\omega \vec{E} / 4\pi k - \omega \vec{P} - i2\pi q \vec{v} \delta(\omega - \vec{k} \vec{v}), \end{aligned} \quad (2)$$

где \vec{k} – волновой вектор, соответствующий фурье-компонентам, $1/4\pi k$ – электрическая постоянная.

Используем изотропную модель нелинейной среды Друде-Лоренца, в которой направление вектора поляризованности среды \vec{P} , как и направление колебаний электронов среды, совпадает с направлением внешнего квазиоднородного поля \vec{E} . Записав уравнение движения электрона в поле \vec{E} с учетом малой ангармонической поправки к квазиупругой потенциальной энергии $U(r) = m\omega_0^2 r^2/2 + \alpha r^3/3$, и используя связь $\vec{P}(t) = -en\vec{r}(t)$, где n – концентрация электронов среды, получаем формулу для определения \vec{P} :

$$\ddot{\vec{P}} + 2\beta\dot{\vec{P}} + \omega_0^2\vec{P} = \frac{e^2 n}{m}\vec{E} + \frac{\alpha\vec{P}\vec{P}}{emt}.$$

Здесь β – коэффициент затухания, ω_0 – собственная частота колебаний электронов, а m, e – их масса и заряд. Отсюда следует уравнение для фурье-компоненты вектора \vec{P} :

$$(-\omega^2 - 2i\beta\omega + \omega_0^2)P(\omega) = \frac{e^2 n}{m}E(\omega) + \frac{\alpha}{2\pi n m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega_1)P(\omega_2)\delta(\omega - \omega_1 - \omega_2)d\omega_1 d\omega_2. \quad (3)$$

Решение уравнения (3) ищем, ограничиваясь квадратичной нелинейностью среды. Результирующее поле \vec{E} также разлагаем в ряд по малому параметру теории возмущений α , характеризующему величину малой ангармонической поправки:

$$P(\omega) = P_0(\omega) + P_1(\omega), \quad E(\omega) = E_0(\omega) + E_1(\omega),$$

где $P_0 \sim E_0$, $E_1 \sim \alpha$ и $P_1 \sim \alpha E_0^2, E_1$. В результате уравнение (3) разделяется на два уравнения в нулевом и первом порядках теории возмущения. Если подставить их решения в систему (2), то оказывается, что ее можно разделить на две системы уравнений. Первая, в нулевом порядке теории возмущений, дает стандартное решение для поля \vec{E}_0 , соответствующего черенковскому излучению в линейной среде. Все эффекты нелинейности среды проявляются в малом добавке \vec{E}_1 , полученном при решении второй системы, записанной в первом порядке теории возмущений:

$$\vec{k}(\vec{k}\vec{E}_1) - \vec{E}_1(\vec{k})^2 = \frac{4\pi k\omega^2}{c^2} \left(\frac{\vec{E}_1}{4\pi k} + \vec{P}_1 \right), \quad \frac{\vec{k}\vec{E}_1}{4\pi k} + \vec{k}\vec{P}_1 = 0.$$

Оказалось, что он содержит три полюсных сомножителя:

$$E_1 \sim \frac{\delta(\omega - 2\vec{k}\vec{v})}{(\vec{k}^2 - \omega^2\varepsilon/c^2)(\vec{k}^2 - (\vec{k}\vec{v}/c)^2\varepsilon)(\vec{k}^2 - (\omega - \vec{k}\vec{v})^2\varepsilon/c^2)} \quad (4)$$

После подстановки $\vec{k}\vec{v} = kv\cos\theta$ находим, что второй и третий сомножители в формуле (4) соответствуют распространению излучения в конус (1). Первый сомножитель дает неочевидный результат: излучение с напряженностью \vec{E}_1 создает конус с углом раствора

$$2\theta = 2\arccos(v_{ЭМ}/2v). \quad (5)$$

Как видно, возникает дополнительный конус очень слабого черенковского излучения с вдвое меньшим косинусом угла раствора (5), связанный с эффектом генерации удвоенной частоты 2ω в нелинейной среде. Заметим, что этот эффект может возникать при скорости частицы $v < v_{ЭМ} = c/\sqrt{\varepsilon}$, т.е. при скорости, меньшей скорости света в данной среде. Для этого необходимо выполнение условия $v < c/\sqrt{\varepsilon} < 2v$.

Теоретическое исследование спектра К-фотопоглощения атома Ве

Каспржицкий Антон Сергеевич

Ростовский Государственный Университет

Бугаев Лусеген Арменакович, д.ф.-м.н.

Anton1982@mail.ru

Многие физические процессы при их количественном описании требуют уточнения волновой функции системы по сравнению с приближением Хартри-Фока (ХФ). Известно большое количество работ, посвященных решению этой проблемы, например [1,2].

В данной работе рассмотрено влияние учета корреляций в движении электронов на сечение К - поглощения атомом Ве.

Исследование выполнено в два этапа. На первом этапе, методом наложения конфигураций, изучен вопрос влияния корреляций на полную энергию атома Ве. В расчете учтены 28 конфигурации вида: $1s^2nl^2$ и $1s^2nlml$ с $2 \leq n, m \leq 5$ и $l \leq 3$. Установлено, что наибольший вклад в корреляционную энергию (КЭ) вносят конфигурации $1s^2nmp$ (45,6% экспериментального значения $KЭ_{ЭКСП} = 0,0944a.e$ [2]), причем, 40% КЭ связано с учетом конфигурация $1s^22p^2$.

На втором этапе работы выполнен расчет сечения К –фотопоглощения. Расчет осуществлен в двух приближениях.

Приближение 1. Радиальные части волновых функций электронов начального состояния перехода $1s^22s^2$ получены решением уравнения ХФ в терме 1S . При расчете радиальных частей волновых функций электронов конечного состояния перехода первоначально, в приближении «перестроенного остова», в терме 2S определены функции атомного остатка $1s^12s^2$. Радиальные части функций фотоэлектронов рассчитаны в приближении «замороженного остова» в терме 1P . Сечения фотопоглощения определены в приближении неортогональных орбиталей. Конфигураций $1s^12s^22p$ и $1s^12s^23p$ получены в приближении «перестроенного остова», в терме 1P . Сечения фотопоглощения определены в приближении неортогональных орбиталей [3].

Приближение 2. Дополнительно учтено взаимодействие начальной и конечной конфигураций перехода (Приближение 1) с $1s^22p^2(^1S)$ и $1s^12p^2kp$, соответственно. В приближении перестроенного остова, в терме 2S определены функции атомного остатка $1s^12p^2$. Радиальные части функций фотоэлектронов рассчитаны в приближении «замороженного остова» в терме 1P . Конфигураций $1s^12p^3$ и $1s^12p^23p$ получены в приближении «перестроенного остова», в терме 1P .

На Рис.1. результаты расчета сечений фотоионизации в приближениях 1 и 2 сопоставлены с экспериментальными результатами [2]. Отличие величин сечений фотопоглощения, определенных в форме «скорости» и «радиуса» для матричного элемента оператора электрического дипольного перехода практически не зависит от выбранного приближения и составляет 4-5%. Переход от Приближения 1 к Приближению 2 приводит к возникновению серии резонансных состояний. Положение резонансов совпадает соответствующими в экспериментальных результатах.

Рассчитанные в данной работе абсолютные значения сечений фотоионизации атома Ве находятся в хорошем согласии с результатами расчетов других авторов [2].

Дальнейшее развитие теоретических исследований может быть связано с дополнительным учетом конфигураций в начальном и конечном состояниях перехода; корреляций в приближение случайных фаз с обменом (ПСФО) и процессов кратного поглощения / ионизации.

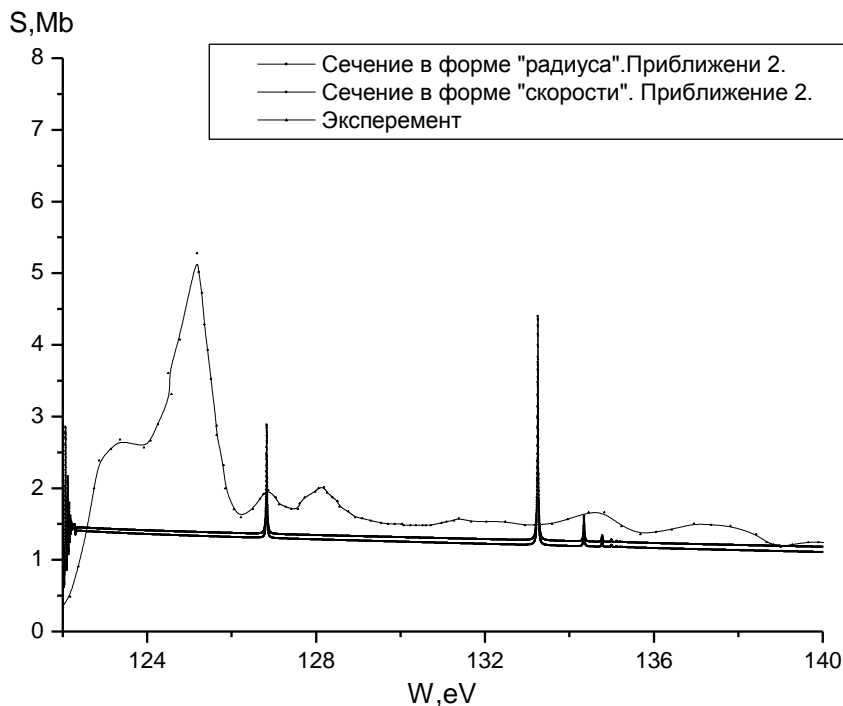


рис.1

Список публикаций:

- [1] Демехин В.Ф., Демехин Ф.В., Кочур А.Г., Демехина Н.В. // Журнал Структурной Химии - 1998, 39, №6
 [2] Hari P., Saha and C. Denise Caldwell // Phys. Rev A. - 1989. - 40. - P. 7020-7025
 [3] Сухоруков В.Л., Демехин В.Ф., Тимошенко В.В. // Оптика. Спектроскопия - 1979. 47, №2 стр 407-409

Гармонический трекинг частиц в циклическом ускорителе

Квардаков Василий Аркадьевич

Левичев Евгений Борисович

Новосибирский Государственный Технический Университет

Кулипанов Геннадий Николаевич

v.a.kvardakov@inp.nsk.su

Гармонический трекинг – метод для исследования нелинейного движения частицы в циклическом ускорителе [1]. Метод основывается на численном решении гамильтониана потенциала возмущения разложенного в ряд по гармоникам. Интегрирование выполняется по независимой координате - азимута. Гармонический трекинг реализован с использованием метода канонического интегрирования любого порядка [2]. Этот метод интегрирования гамильтоновых уравнений движения, основан на замене непрерывной гамильтоновой системы неявным каноническим отображением. Реализация неявного отображения осуществляется по схеме «предиктор-корректор», где в качестве предиктора используется явное отображение Ли.

Особенностью гармонического трекинга в том, что он позволяет легко (фактически вручную) управлять гармониками возмущения, описывающими нелинейный потенциал, и тем самым оптимизировать параметры нелинейной системы.

Список публикаций:

- [1]. R.Nagaoka et al. Nonlinear dynamics with sextupoles in low-emittance light source storage rings. – NIM A302 (1991) 9-26.
 [2]. Вечеславов В.В. Метод канонического интегрирования любого порядка. Препринт 89-35, ИЯФ СО РАН.

Модель ионного распыления металла в виде больших кластеров

Кочкин Сергей Алексеевич

Поморский Государственный Университет

Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м. н.

moozey@mail.ru

Процессы ионного распыления твердых тел являются объектом интенсивных фундаментальных экспериментальных и теоретических исследований. Во многих случаях экспериментальные исследования таких процессов направлены на выяснения механизмов распыления многоатомных частиц. Обычно проводятся измерения энергетических спектров и распределений нейтральных и однократно заряженных кластеров по размерам в зависимости от типа мишени, состава и тока бомбардирующих частиц, а также зависимостей выхода нейтральных и заряженных кластеров от температуры мишени, несущих более подробную информацию о механизмах формирования кластеров. Ранее [1,2] нами была разработана теория ионного распыления металла в виде больших кластеров с числом атомов в их составе $N \geq 5$. Основой механизма ионного распыления, согласно этой теории, является представление о распылении металла в виде кластеров путем внезапной «раздачи» импульсов атомам мишени от движущегося иона. В теории вводится варьируемый параметр q , имеющий смысл средней величины импульса, полученного атомом мишени при развитии каскада столкновений. Значения этого параметра подбирались из экспериментальных данных и были табулированы для различных комбинаций ион-мишень. В настоящей работе на основе физических представлений, предложенных Линдхардом [3,4], и метода расчета полного выхода кластеров [1] получено простое выражение для среднего импульса q , зависящего от энергии, определяющей глубину осцилляторной ямы, в которой находится каждый атом твердого тела, массы атома и параметра взаимодействия, лежащего в основе подхода, предложенного Линдхардом. Тем самым, в данной работе устраняется недостаток теории ионного распыления, когда одна из основных физических величин не вычислялась из первых принципов.

Считаем твердое тело образованным из атомов, каждый из которых находится в осцилляторной яме глубиной Δ и имеет собственную частоту ω . Характерный период колебаний $T=2\pi/\omega$. Пусть скорость падающего иона такова, что за время $\tau \ll T$ ион и быстрые атомы отдачи при движении в металле претерпевают большое число столкновений, в результате которых атомы металла получают некоторые импульсы \bar{q}_i , где i - номер атома. Тогда, согласно [1,2], полная вероятность вылета кластера из N атомов и зарядом Qe (e - заряд электрона) равна

$$\bar{W}_N^Q = \left[1 - \left(1 + \frac{2}{3} \frac{q^2}{2mU_N} \right)^{-3/2} \right] \exp\left(-N \frac{q^2}{2m\Delta} \right) \frac{1}{D_N} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{(Q-Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2 + \beta} \right\} \quad (1)$$

где q - средний импульс, полученный атомом мишени при развитии каскада столкновений, m - масса атома, $U_N = \sigma S_N = \delta N^{2/3}$ - энергия связи кластера с металлом [1,2], δ - имеет смысл энергии связи кластера, отнесенной к одному атому в составе кластера (и, вообще говоря, δ отличается от Δ - глубины потенциальной ямы, в которой находится каждый атом твердого тела). В формуле (1)

$$D_N = \sum_Q \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{(Q-Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2 + \beta} \right\}, \quad (\Delta Q_N)^2 = \frac{3^{1/3} m_e \Theta}{\pi^{4/3} \hbar^2} \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} \gamma^{1/3} N, \quad Q_0 = \frac{3^{1/3} m_e \Delta \mu}{\pi^{4/3} \hbar^2} \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} \gamma^{1/3} N,$$

где m_e - масса электрона зоны проводимости, V - объем кластера, Θ - температура мишени, γ - валентность атомов металла, \hbar - постоянная Планка, β - параметр, соответствующий квантовым флуктуациям заряда при нулевой температуре мишени, $\Delta \mu$ - разность между уровнями Ферми в металле и в кластере.

На основе линдхардовского степенного сечения $\sigma(\varepsilon) = C_s / \varepsilon^{1+1/s}$ [3,4], описывающего столкновения между первичной частицей и атомами мишени в твердом теле, где s - параметр взаимодействия, который для столкновений ионов с энергиями порядка нескольких кэВ и средних масс атомов и ионов составляет величину порядка двойки, C_s - постоянная, зависящая от параметра s , масс и зарядов сталкивающихся частиц, энергии падающего иона, вычислена средняя энергия, которой обладают атомы в металле после большого числа соударений при развитии каскада столкновений:

$$\bar{\varepsilon} = \bar{q}^2 / 2m = \Delta / (s-1)^s, \quad (2)$$

то есть теперь ранее не вычисляемый в нашей теории средний импульс $q \equiv \bar{q}$, которым обладают атомы мишени при развитии каскада столкновений, стал иметь обоснование:

$$q = \sqrt{2m\Delta/(s-1)^s}.$$

Таким образом, с учетом полученного выражение для полной вероятности вылета кластера из N атомов и зарядом Qe (e - заряд электрона) приобретает следующий вид

$$\bar{W}_N^Q = \left[1 - \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}}{U_N} \right)^{-3/2} \right] \exp\left(-N \frac{\bar{\varepsilon}}{\Delta} \right) \frac{1}{D_N} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{(Q-Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2 + \beta} \right\}, \quad (3)$$

где энергия $\bar{\varepsilon}$ определяется выражением (2).

В работе рассчитаны в зависимости от числа атомов в составе кластеров полные выходы и энергетические спектры (см. [2]) однозарядных и нейтральных кластеров тантала, ниобия и железа при бомбардировке атомарными ионами аргона, золота и ксенона. Достигнуто хорошее согласие с экспериментами.

Авторы благодарны Минобразованию РФ за финансовую поддержку работы (шифр гранта А04-2.9-918).

Список публикаций:

- [1] В.И.Матвеев, ЖТФ, 72, 115-119 (2002).
- [2] В.И.Матвеев, С.А.Кочкин, ЖТФ, 74, 65-71 (2004).
- [3] P.Sigmund, Phys. Rev. 184, 383-416 (1969)..
- [4] Д.Фальконе, УФН. 162, 71-117 (1992).

Спектр магнитоупругих волн в мультислойных структурах

Лалетин Олег Николаевич

Институт Физики им. Киренского СО РАН

Игнатченко Вальтер Алексеевич, д. ф.-м. н.

olal@iph.krasn.ru

Развивается теория спектра магнитоупругих (МУ) волн в мультислойных структурах (МС), состоящих из чередующихся ферромагнитных слоев двух разных типов, изотропных по отношению к упругим и магнитоупругим свойствам. В общем случае разные типы слоев характеризуются разными магнитными, упругими и магнитоупругими параметрами. Оси легкого намагничивания в каждом типе слоев, постоянное внешнее магнитное поле направлены перпендикулярно плоскостям слоев. Рассматривается распространение связанных магнитных и упругих волн перпендикулярно плоскостям слоев. Получен аналитически и численно исследован закон дисперсии МУ волн в общей форме. Результат численного расчета закона дисперсии $k(\omega)$

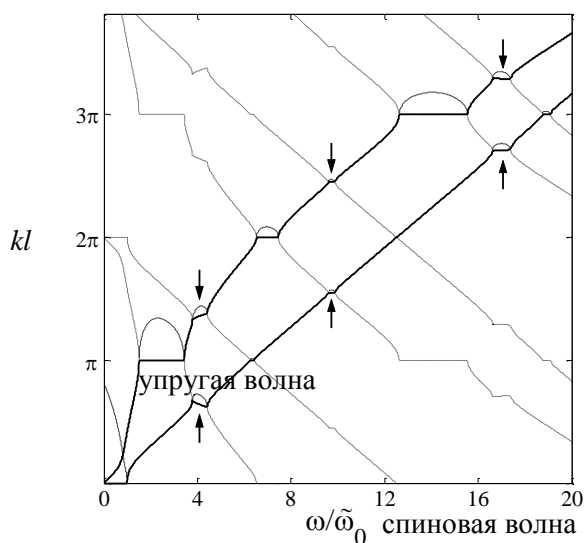
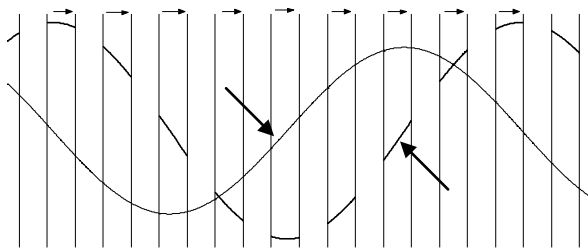


рис. 1. Закон дисперсии МУ волн в МС.

представлен на рис. 1 в схеме расширенных зон ($\omega_0 \approx 9.1\text{GHz}$, l – период МС). При построении этого графика использовались магнитные и упругие параметры, соответствующие параметрам большинства веществ; для наглядности графика для величин параметра МУ связи взяты значения большие реальных. Сплошными кривыми на графике изображены главные ветви дисперсионного закона, пунктирными – вспомогательные; штриховые кривые соответствуют мнимым компонентам волнового числа k . Обычные щели в спектре видны на рис. 1 на границах зон Бриллюэна ($kl = \pi n, n = 1, 2, 3, \dots$). Граничные частоты запрещенных зон различны для квазиспиновых и квазиупругих дисперсионных ветвей. Помимо этих щелей в спектре присутствуют щели, обусловленные МУ взаимодействием. МУ щель, соответствующая пересечению главных ветвей, на рис. 1 находится в 1-ой зоне Бриллюэна; она характерна и для однородной среды и незначительно модифицируется из-за наличия периодической неоднородности материальных параметров МС. МУ щели в последующих зонах Бриллюэна представляют собой новый эффект, являющийся следствием как периодичности системы, так и МУ связи. Они располагаются на пересечении главной ветви одной физической природы со вспомогательными ветвями другой физической природы (показано стрелками на рис. 1). Как видно из рис. 1, спектр МС в общем случае является очень сложным, поэтому были детально



проанализированы различные предельные случаи. Первый случай соответствует отсутствию магнитоупругого взаимодействия (независимые магнитная и упругая МС). В данном случае рассмотрены две ситуации: малое отличие величин намагниченностей в соседних слоях ($M_1 \approx M_2$) и малая величина намагниченности в одном типе слоев $M_1 \gg M_2$. В последней ситуации получен закон дисперсии спиновых волн в аналитической форме и показано, что эффективный параметр спин-волновой жесткости уменьшается пропорционально $\exp[-(M_1/M_2)^{1/2}]$, когда

$M_2 \rightarrow 0$. Предельным случаем последней ситуации ($M_2 = 0$) является МС, состоящая из магнитных слоев, разделенных немагнитными слоями, в которой распространение спиновых волн невозможно. Следующий случай соответствует наиболее интересной ситуации, когда МС состоит из чередующихся магнитоупругих и немагнитных упругих слоев. Получено, что в такой МС распространяются МУ волны, т. е. наряду с волной $u(z, t)$ распространяется эффективная волна $m(z, t)$. В действительности картина выглядит следующим образом (рис. 2). Упругая волна распространяется как через магнитные (отмечены стрелками), так и через немагнитные слои. Спиновая волна распространяется только в магнитных слоях, т.е. реальный профиль спиновой волны является разрывным. Другими словами, МУ взаимодействие приводит к возможности динамического переноса магнитных возбуждений через немагнитные слои. При малых k вдали от магнитоупругого резонанса для квазимагнитной ветви $\omega(k)$ получен квадратичный закон дисперсии, по виду совпадающий со стандартным законом дисперсии вида $\omega = \omega_0 + Dk^2$, где ω_0 - частота ФМР, в котором параметр спиновой жесткости D определяется не обменом, а МУ связью: $D = \gamma^2 g M_1^3 v^2 l_1 / (\mu \omega_0^2 l)$, где γ - магнитоупругий параметр, g - гиромагнитное отношение, v - скорость упругих волн, μ - упругий параметр, l_1 - толщина магнитоупругого слоя.

Работа поддержана РФФИ, грант № 04-02-16174, Красноярским Краевым научным фондом, грант № 12F0013С.

Математическое моделирование процессов лазерной СВС-сварки металлов и сплавов

Манайчев Константин Александрович

Новосибирский Государственный Университет

Ковалев Олег Борисович д.ф.-м.н

totkot@ngs.ru

Существует СВС-сварка тугоплавких и разнородных материалов, которая основана на экзотермическом взаимодействии компонентов реакционной смеси, расположенной в зазоре между соединяемыми материалами. Сварка осуществляется в режиме электротеплового взрыва, когда реакционную смесь нагревают до температуры, при которой начинается взаимодействие реагентов. В ходе реакции развивается высокая удельная мощность тепловыделения и скорость нагрева. Образующийся в ходе реакции продукт СВС растекается по поверхности соединяемых материалов. В процессе СВС-сварки одновременно осуществляется синтез тугоплавких материалов и формирование сварного шва. При этом прочность сварного соединения соответствует прочности соединяемых материалов. Недостатком электротепловой СВС-сварки является необходимость предварительного прогрева соединяемых деталей до температуры начала реакции, что неизбежно приводит к появлению остаточных деформаций всей конструкции после остывания.

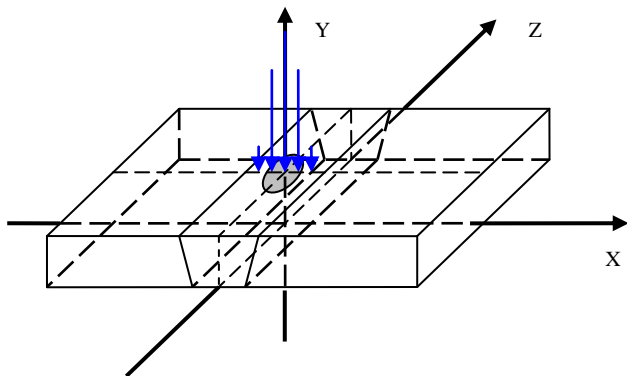


рис.1. Схема использования реагирующей в режиме СВС смеси порошков при лазерной

Предлагаемый способ лазерной СВС-сварки лишен этого недостатка, так как основан на локальном динамическом лазерном нагреве и инициировании реакций синтеза порошковой смеси с выделением тепла непосредственно в зазоре между пластинами. Лазерная СВС-сварка особенно эффективна в случае соединения толстых материалов, так как позволяет понизить мощность излучения и исключить образование паровой полости, которая является источником возникновения различных дефектов в области сварного шва. Математическое моделирование указанных процессов во взаимосвязи позволит рассчитать оптимальные режимы сварки. На рис.1 представлена схема сварки, когда в зазор между соединяемыми пластинами помещается смесь реагирующих порошков. Стрелками указано направление

действия излучения, которое локально нагревает материал и инициирует реакцию СВС. Математическая постановка сводится к уравнениям двухфазной задачи Стефана (1,2), в правой части которых добавляется источниковый член, учитывающий выделение тепла за счёт химических реакций. Дополнительно рассматривается уравнение кинетики (3) аррениусовского типа.

$$c\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t}-V_w\frac{\partial T}{\partial z}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\lambda\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\lambda\frac{\partial T}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}\lambda\frac{\partial T}{\partial z}+Q_{gor}\frac{d\eta}{dt}, \quad (1)$$

$$\rho H\left(\frac{\partial f}{\partial t}-V_w\frac{\partial f}{\partial z}\right)=\lambda_s\frac{\partial T}{\partial n}-\lambda_l\frac{\partial T}{\partial n}, \quad (2)$$

$$\frac{d\eta}{dt}=k_p(1-\eta)^p\exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (3)$$

Граничные условия: $x = \pm L_x/2, \forall y, z: \frac{\partial T}{\partial x} = 0; z = \pm L_z/2, \forall x, y: \frac{\partial T}{\partial z} = 0,$

$$y = 0, \forall x, z: \frac{\partial T}{\partial y} = 0; y = L_y, \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = A(\gamma)I(x, 0, z) \cos(\gamma), \quad (4)$$

$$-L_x/2 \leq x \leq L_x/2; 0 \leq y \leq L_y; -L_z/2 \leq z \leq L_z/2,$$

где, ρ -плотность, λ -теплопроводность, c -теплоёмкость, L_x, L_y, L_z -размеры образца, T -температура, V_w -скорость движения луча, Q_{gor} -теплота реакции, η -степень превращения, t -время, k_p -предэкспоненциальный множитель, p -порядок реакции, E -энергия активации, R -газовая постоянная, \vec{n} -нормаль к границе, f -граница фазового перехода, H -энтальпия фазового перехода, $A(\gamma)$ -коэффициент поглощения, I -интенсивность, γ -угол падения.

Проведены расчёты лазерной СВС-сварки алюминия, используемого в самолётостроении и других областях техники. В качестве СВС реагирующего материала использовалась мелкодисперсная смесь порошков алюминия с никелем. В расчётах определялись температурные поля в зоне сварки, положение внутренней границы плавления и форма ванны расплава. По результатам расчётов можно сделать прогноз и определить необходимую мощность лазера, количество и состав химически взаимодействующего порошка, для того чтобы получить достаточную по величине зону проплавления, и обеспечить сварку листового материала без образования парового канала.

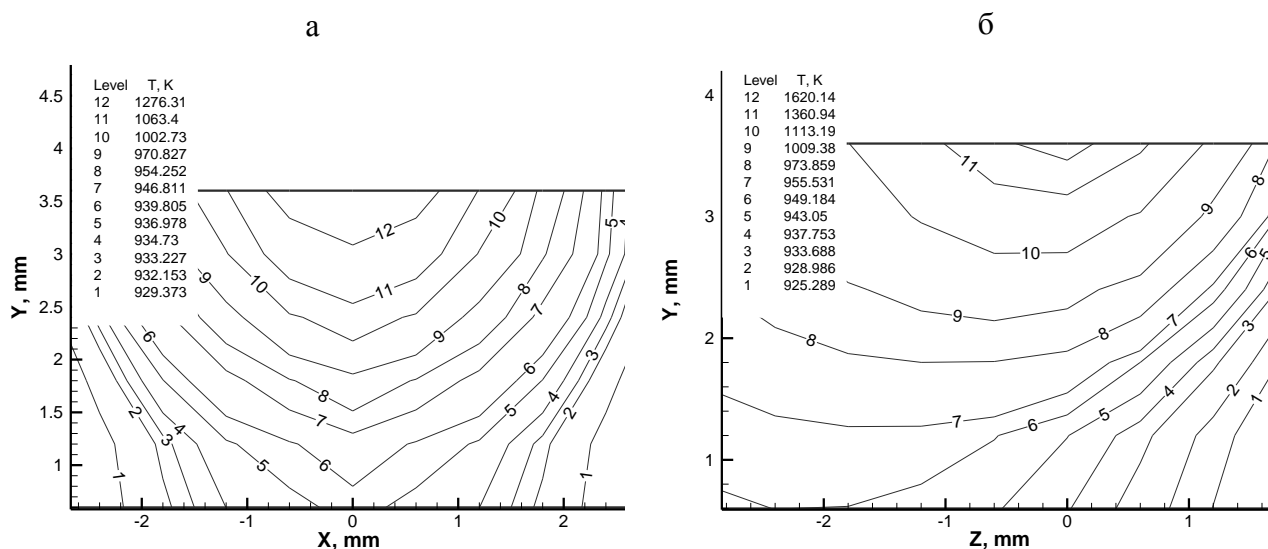


рис. 2. Зависимости температур от координат после прохождения волны горения. Мощность излучения 1 кВт, скорость сварки 1 см/с, толщина алюминиевой пластины 3 мм, ширина зоны засыпки порошка 1.8 мм, коэффициент поглощения 0.1

На рис.2 представлены изолинии распределения температуры в зоне расплава и твёрдом металле в двух взаимно перпендикулярных плоскостях. Уравнения (1-4) решались методом установления ($t \rightarrow \infty$) по явной интегро-интерполяционной разностной схеме второго порядка точности на равномерной сетке. Константы кинетики химических реакций высокотемпературного синтеза порошков задавались из экспериментов, обзор которых проведён в [3]. Получены графики зависимостей температуры, теплоёмкости, теплопроводности, плотности и степени превращения вещества от координат. Граница ванны расплава соответствует температуре плавления алюминия (933 К), что примерно совпадает с изолинией под номером 3 на рис.2.

Список публикаций:

- [1]. Мерджанов А.Г., Боровинская И.П., Штейнберг А.С. и др. Способ соединения материалов. Авторское свидетельство №747661. Бюллетень изобретений № 26, 1980, 55 с.
 [2]. Scherbakov V.A., Shteinberg A.S., SHS Welding of Refractory Materials. International Journal of Self-Propagation High-Temperature Synthesis, Vol.2, N4, 1993, p.357-369.
 [3]. Мерджанов А.Г. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез // Физическая химия. Современные проблемы // Под ред. А.М. Колотыркина. М.: Химия, 1983. с.6-45.

Возможные квантово-когерентные состояния поля промежуточных бозонов в адронах
Мастропас Екатерина Валентиновна
 Ростовский Государственный Педагогический Университет
 Мясников Эдуард Николаевич, д.ф-м.н.
mastropas@mail.ru

Попытки проанализировать проблему конфайнмента в современной теории элементарных частиц привели к осознанию того факта, что структура физического вакуума внутри и вне адрона должна быть различной, т.е. зависеть от расстояния до центра адрона. Квантовая теория утверждает существование так называемых квантово-когерентных состояний бозе-полей, в которых произведение неопределенностей для координаты и импульса поля принимает наименьшее значение. Подобные состояния возникают в случаях отличных от нуля квантовых средних значений. В качестве примера можно привести электрическое поле локализованного состояния электрона в водородоподобном атоме, когда среднее значение потенциала его электрического поля в окружающем пространстве не равно нулю (в отличие от состояния электрона с определенным импульсом, в котором электрическое поле вообще не обладает когерентностью).

В физике твердого тела теория квантово-когерентных состояний бозе-полей была использована для исследования взаимодействия электрона с квантованным электромагнитным полем и полем фононов. По структуре это взаимодействие не отличается от взаимодействия кварков с полем нейтральных промежуточных бозонов, поэтому следует ожидать, что оно также способно формировать состояние поля промежуточных бозонов с отличными от нуля средними значениями внутри адрона.

Математический формализм теории квантово-когерентных состояний основан на использовании унитарного преобразования смещения

$$U_{\vec{k}} = \exp \{ d_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ - d_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}} \}, \quad (1)$$

с помощью которого производится преобразование гамильтониана рассматриваемой системы:

$$H = H_q + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \hbar \omega_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} - \frac{F}{|\vec{k}|} \left[b_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} + b_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right] \right\}, \quad (2)$$

здесь H_q - гамильтониан поля кварков, F - константа, $b_{\vec{k}}^+$ и $b_{\vec{k}}$ - операторы рождения и уничтожения промежуточных бозонов. При вычислении среднего значения $\langle d | H | d \rangle$ вектор основного состояния системы выбирают в виде

$$|d\rangle = \psi_0(\vec{r} - \vec{R}) \exp \left\{ \sum_{\vec{k} \neq 0} (d_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ - d_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}}) \right\} |0\rangle, \quad (3)$$

где $|0\rangle$ - вектор основного состояния поля промежуточных бозонов в отсутствии деформации вакуума, \vec{R} - произвольный вектор прямого пространства, а $\psi_0(\vec{r})$ - нормированная волновая функция кварка в основном

состоянии. Условие минимума $\frac{d}{d|d_{\vec{k}}|}\langle d|H|d\rangle=0$ (здесь введено обозначение $d_{\vec{k}} = |d_{\vec{k}}|e^{i\varphi_{\vec{k}}}$) приводит в рассматриваемом случае центральной симметрии состояния (3) к соотношению

$$|d_{\vec{k}}| = \frac{F'}{|\vec{k}|} \cos(\vec{k}\vec{R} + \varphi_{\vec{k}}) \cdot \eta_{\vec{k}}, \quad (4)$$

где $\eta_{\vec{k}}$ - \vec{k} -я Фурье-компонента функции $|\psi_0(\vec{r})|^2$, F' - константа. Можно показать, что минимуму функции $\langle d|H|d\rangle$ по переменной $\varphi_{\vec{k}}$ соответствует условие

$$\varphi_{\vec{k}} = -\vec{k}\vec{R} + 2\pi C(\vec{k}\vec{R}), \quad (5)$$

где $C(\vec{k}\vec{R})$ - целое число, которое при заданном $\vec{k}\vec{R}$ выбирается так, чтобы фаза $\varphi_{\vec{k}}$ оказалась внутри основного интервала $(-\pi, +\pi)$. Отметим, что, согласно (5), фаза выражается через параметры, которым можно придать определенное значение. Следовательно, в состоянии $|d\rangle$, соответствующему минимуму $\langle d|H|d\rangle$, поле промежуточных бозонов является квантово-когерентным; это поле нарушает трансляционную симметрию системы. Итак, при условии (5) минимуму $\langle d|H|d\rangle - \langle H_q \rangle = -\sum_{\vec{k} \neq 0} \hbar \omega_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^* d_{\vec{k}}$ соответствует

$|d_{\vec{k}}| = \frac{F''}{k} \eta_{\vec{k}}$. Это позволяет утверждать, что общая энергия поля промежуточных бозонов с учетом его взаимодействия с кварками в адроне может быть отрицательной в квантово-когерентном состоянии этого поля. Возможность существования такого состояния и понижения энергии системы связана с возможностью существования кварков в таких состояниях, при которых величина η^2 отлична от нуля.

Оценка статистической суммы протяженной системы двухуровневых атомов взаимодействующих с электромагнитным полем

Мигаль Оксана Александровна

Белорусский Государственный Университет

Феранчук Илья Давыдович, д.ф.-м.н.

Ksusha Migal@tut.by

Взаимодействие системы двухуровневых атомов с квантовым полем довольно хорошо изучено и находит свое применение в физике и технике лазеров. Такого рода задачи изучают с использованием ряда приближений таких, как приближение вращающейся волны и ограничения на размер системы $L \ll \lambda$, где λ - длина волны излучения. Эти приближения упрощают гамильтониан, однако имеют ограниченную область применения [1].

Одним из эффективных методов квантовой механики развиваемых для решения уравнения Шредингера, является операторный метод (ОМ), положенный в основу наших вычислений [2]. Отличительная особенность такого метода, по сравнению с другими методами заключается в том, что даже в нулевом приближении метод обеспечивает хорошее согласие с другими теоретическими моделями.

Известно, что все термодинамические свойства системы могут быть выражены через статистическую сумму. Поэтому использование ОМ в задаче об оценке статистической суммы системы двухуровневых атомов представляет большой прикладной интерес.

Выражение для статистической суммы системы можно записать в виде: $Z = \sum_{\nu} \Gamma(\nu) e^{-\beta E_{\nu}}$, где $\Gamma(\nu)$ - кратность вырождения, $\beta = kT$.

Гамильтониан взаимодействия системы двухуровневых атомов с электромагнитным полем имеет вид: [1]

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{\omega_0}{2} \sigma_{j3} + \varepsilon a^{\dagger} a - \frac{g}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j^+ + \sigma_j^-) (a e^{i\vec{k}\vec{r}_j} + a^{\dagger} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}) \quad (1)$$

Тогда в нулевом приближении ОМ можно получить оценку статистической суммы в следующем виде:

$$Z \approx Z_0 = \exp \left\{ -\beta \left(\frac{e^{-\beta\varepsilon} N}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} + V^2 \right) \varepsilon + \frac{1}{2} \varpi_0 \frac{\left(2 \frac{e^\Phi}{1 + e^\Phi} - 1 \right) N}{\Omega} \int \gamma_3 d\vec{r} - \frac{g}{2} \frac{\left(2 \frac{e^\Phi}{1 + e^\Phi} - 1 \right) N}{\Omega} \int \gamma_{1,2} 2V \cos(\vec{k}\vec{r}_j + \varphi) d\vec{r} \right\} - \quad (2)$$

$$- \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} \ln e^{-\beta\varepsilon} - N \frac{e^\Phi}{1 + e^\Phi} \ln e^\Phi + N \ln(1 + e^\Phi) - \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}),$$

$$\text{где } \Phi = \frac{1}{N} \left\{ -\frac{\beta N \omega_0}{\Omega} \int \gamma_3 d\vec{r} + \frac{\beta g N}{\Omega} \int 4\gamma_{1,2} V \cos(\vec{k}\vec{r} + \varphi) d\vec{r} \right\},$$

$$\frac{\partial Z_0}{\partial \gamma_{1,2}} = \frac{\partial Z_0}{\partial \gamma_3} = \frac{\partial Z_0}{\partial V}.$$

Свободные параметры преобразования V и γ_j определяются из следующих условий:

$$(\gamma_3)^2 + \gamma_1 \gamma_2 = 1, \quad (3)$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_{1,2} = \mp \frac{4gV}{\omega_0} \frac{\cos(\vec{k}\vec{r}_j + \varphi)}{\sqrt{1 + \frac{16g^2}{\omega_0} V^2 \cos^2(\vec{k}\vec{r}_j + \varphi)}}. \quad (4)$$

$$\mp \frac{\omega_0 \varepsilon}{4g^2} = (2\xi - 1) \frac{N}{\Omega} \int \frac{\cos^2(\vec{k}\vec{r}_j + \varphi)}{\sqrt{1 + \frac{16g^2}{\omega_0} V^2 \cos^2(\vec{k}\vec{r}_j + \varphi)}} d\vec{r}. \quad (5)$$

где $\xi = \frac{n_+}{n}$, n_+ - концентрация атомов находящихся в возбужденном состоянии, N - полное число атомов, g - константа связи системы частиц с полем, Ω - объем системы.

Совместное решение (2) - (5) дает возможность вычислить статистическую сумму при любых значениях величин (λ^3/Ω) и концентрации возбужденных атомов.

Список публикаций:

- [1]. Альперин М. М., Клубис Я. Д., Хижняк А. И. Введение в физику двухуровневых систем. - Киев: Наук. думка, 1987. - 224с.
 [2]. Feranchuk I. D., Komarov L. I., Ulyanenko A. P. Two-level system in a one-mode quantum field: numerical solution on the basis of the operator method // J. Phys. A. Math. Gen. 29 (1996) 4035-4047.
 [3]. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. - Москва: Наука, 1965. - 336с

Рождение пар и процесс ионизации при столкновениях тяжёлых релятивистских ионов

Пашев Игорь Николаевич

Поморский Государственный Университет

Матвеев Виктор Иванович, к.ф.-м.н.

pashev.igor@pomorsu.ru

На основе точного решения уравнения Дирака в высокоэнергетическом приближении рассмотрены электронные переходы при столкновении тяжёлого атома с быстрым ионом. Развита методика расчёта вероятностей и сечений переходов, получены зависимости от величины параметра удара вероятностей ионизации и рождения электрон-позитронных пар. При расчётах в качестве волновых функций связанных состояний использованы [1] функции Дарвина и для состояний непрерывного спектра - функции Зоммерфельда-Мауэ.

Выбор соответствующей калибровки поля ультрарелятивистского иона, движущегося вдоль оси x с околосветовой скоростью, позволяет выразить его потенциал через δ -функцию [2]:

$$V(\mathbf{s}, x; t) = -\frac{Z}{c} (1 - \alpha_x) \delta(x - ct) \ln \frac{(\mathbf{b} - \mathbf{s})^2}{b^2}, \quad (1)$$

здесь Z - заряд снаряда, c - скорость света, α_x - матрица Дирака, \mathbf{b} - прицельный параметр, \mathbf{s} - проекция радиус-вектора атомного электрона на плоскость прицельного параметра, t - время.

Такой потенциал позволяет точно решить [3] уравнение Дирака и получить амплитуды электронных переходов из состояния j с энергией E_j в состояние f с энергией E_f :

$$a_{ff} = \langle f | (1 - \alpha_x) \exp[i(E_f - E_j)x/c] \exp[-i \frac{Z}{c} \ln \frac{(b-s)^2}{b^2}] | j \rangle$$

Этот результат можно привести в соответствие с полученным [4] нами ранее введением Фурье-преобразования потенциала (1). Фурье-образ имеет вид:

$$\Phi(q) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{iqs} \exp[-i \frac{Z}{c} \ln \frac{(b-s)^2}{b^2}] d^2s = e^{iqb} \left(\frac{b^2}{4}\right)^{iZ/c} \pi^{-1} q^{-2+2iZ/c} \frac{\Gamma(1-iZ/c)}{\Gamma(iZ/c)} = e^{iqb} f(q)$$

Приведённое в [4] выражение вероятности $P(q)$ перехода зависящей от величины переданного импульса q , позволяет вычислить сечение соответствующего процесса:

$$\sigma = \int |a_{ff}(b)|^2 d^2b = \int |f(q)|^2 P(q) d^2q$$

В дополнение мы сравнили наш расчёт вероятности переходов в приближении больших ($b \gg s$) параметров удара с точным результатом [3] для столкновений Pb+Pb:

$b, \text{ фм}$	Ионизация К-оболочки		Связанно-свободная пара	
	Результат [3]	Наш расчёт	Результат [3]	Наш расчёт
1000	0.169	0.234	1.230e-04	1.767e-04
2000	0.052	0.048	3.314e-05	4.550e-05
4000	0.009	0.010	8.288e-06	1.146e-05
8000	0.0020	0.0025	2.0696e-06	2.8709e-06

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 04-02-16177-а) и международного фонда ИНТАС (GSI-INTAS Call 2003. Project №. 03-54-4294).

Список публикаций:

- [1] J. Eichler. *Phys. Rep.* 193, 165-277 (1990)
- [2] C. A. Bertulani. *Phys. Rev. A* 63, 062706 (2001)
- [3] J. A. Baltz. *Phys. Rev. Lett.* 78, 1231 (1997)
- [4] Матвеев В. И., Пашеев И. Н. *ЖТФ.* 2004. Т74. N12. С.21-25.

Конденсат возбужденных состояний в магнии

Попов Андрей Валерьевич

Алтайский Государственный Университет

Нажалов Альберт Иосифович, к.ф.-м.н.

andrey.popov@barnaul.ru

Впервые о конденсированном возбужденном состоянии (КВС) упоминается в работе [1]. Общая теория КВС в атомах, молекулах, примесных центрах твердых тел изложена в [2]. В [3] упоминается о КВС в кластерах углеводородов и о водородных слоях КВС на поверхности. В [4,5] приведены экспериментальные и теоретические результаты по конденсированным состояниям в системе возбужденных атомов цезия. В [4] отмечено, что и атомы щелочных металлов при энергиях возбуждения, близких к энергиям ионизации могут образовать метастабильный конденсат. Возможно, что КВС образуется и естественным образом. Например, шаровая молния может быть описана как КВС [6]. Предположение о том, что КВС является самой общей формой материи в межзвездном пространстве, было подтверждено в результате изучения не идентифицированных инфракрасных полос, которые доминируют в эмиссионных спектрах космического излучения. В целом же нельзя не согласиться с заключением обзора [7] о том, что идея КВС, несмотря на свою простоту, пока что недостаточно эксплуатируется как теоретиками, так и экспериментаторами, и за последние годы рассматривалась весьма ограничено.

В настоящей работе представлены результаты теоретического исследования КВС в магнии с учетом ширины атомных уровней. Идея учитывать ширину атомных уровней впервые использовалась в [8] при

вычислении возбужденных водородных волновых функций. Мы применили эту идею для описания возбужденных состояний многоэлектронных систем [9]. В качестве базисного метода использовали метод Хартри-Фока. Из всех одноэлектронных методов именно этот метод является, на наш взгляд, наиболее последовательным. В нем четко сформулированы все приближения и, в принципе, ясно, что надо сделать, чтобы выйти за рамки этого приближения и получать все более точные результаты.

При стандартном решении спектральной задачи предполагается, что волновая функция многоэлектронного атома регулярна и непрерывна по угловым переменным. Это требование приводит к решениям с целочисленными значениями орбитального и магнитного квантовых чисел $l=0,1,2,\dots$ и $m=0,\pm 1,\pm 2,\dots,\pm l$. Произвольное поведение волновой функции по азимутальной переменной снимает ограничение на целочисленные значения параметра l . Будем считать его, в общем случае, комплексным $L=l+x+iy$, где l , как и прежде, пусть пробегает целочисленные значения. Тогда область изменения добавки $x+iy$ может быть определена как $|x|<0.5$ и $|y|<0.5$. Отказ от выше указанных ограничений позволяет включить в рассмотрение и движение электронов с орбитальным затуханием. В этом случае, задача отыскания спектра возбужденных состояний атома может быть сведена к проблеме собственных значений стационарного уравнения. Заметим, что при $y \neq 0$ она является существенно неэрмитовой с комплексными значениями энергий. Перебирая все возможные значения $|x|<0.5$ и $|y|<0.5$ в процессе поиска самосогласованных решений можно проследить по минимуму полной энергии возбужденного атома за его спектральными характеристиками.

Поставленную задачу мы решали методом Рутана в базе гауссовых функций. В качестве объекта исследований сначала был выбран бериллий – один из простейших элементов периодической системы Д.И. Менделеева. Как и следовало ожидать, в рентгеновском диапазоне энергий возбуждения КВС в бериллии не образуется [9]. КВС обнаружен в оптическом диапазоне в полях возбуждения очень большой интенсивности, сравнимой с интенсивностью поля самого атома [10]. Для проверки предположения о том, что КВС легко получить и в полях слабой интенсивности, мы поместили интересующий нас атом в поле другого атома бериллия. Вычисления показали, что в Ve_2 образуются короткоживущие возбуждения с интенсивными переходами электронов в состояния $2p$ -симметрии. При этом система Ve_2 становится наиболее стабильной при расстояниях между атомами порядка четырех боровских радиусов. Полученные нами данные позволяют предполагать, что если интересующий нас атом бериллия поместить в поле двух, трех, и большего числа атомов, то может образоваться КВС, еще более стабильный по энергии и более продолжительный по времени жизни.

Еще перспективнее, на наш взгляд, работать с более тяжелыми элементами. Для проверки предположения о том, что чем тяжелее димер, тем больше время жизни его возбуждения, мы выбрали магний – элемент из той же второй группы периодической системы Д.И. Менделеева, что и бериллий. Расчеты выполнили в рамках выше описанной схемы. Оказалось, что в Mg_2 возможно образование КВС при любых, даже сколь угодно малых интенсивностях возбуждений в оптическом диапазоне энергий. При этом, чем меньше интенсивность, тем больше время жизни и меньше глубина потенциальной ямы для КВС в Mg_2 . Налицо конкуренция между глубиной потенциальной ямы для КВС и временем жизни его существования. Наиболее устойчивые возбуждения в Mg_2 реализуются при расстояниях между атомами порядка 9 боровских радиусов, в Ve_2 – при 4 боровских радиусах. КВС в Mg_2 более стабилен, чем в Ve_2 как по временам жизни, так и глубине потенциальных ям.

Работа выполнена при поддержке фонда некоммерческих программ «Династия» и МЦФФМ.

Список публикаций:

- [1] Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П. // Докл. АН СССР. 1981. Т.260. №5. С.1096-1098.
- [2] Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П. // ЖЭТФ. 1983. Т.84. №2. С.442-453.
- [3] Holmlid L., Manukin E.A. // ЖЭТФ. 1997. Т.111. №5. С.1601-1610.
- [4] Ярыгин В.И., Сидельников В.Н., Касиков И.И., Миронов В.С., Тулин С.М. // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т.77. №6. С.330-334.
- [5] Норман Г.Э. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т.73. №1. С.13-16.
- [6] Норман Г.Э. // Хим. физика. 1999. Т.18. №7. С. 78-86.
- [7] Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П. // Хим. физика. 1999. Т.18. № 7. С. 87-100.
- [8] Яновичус А., Шучуров В. // Литовский физ. сборник. 1968. Т.8. №1-2. С.47-51.
- [9] Попов А.В. // Оптика и спектроскопия. 2002. Т.93. №1. С. 5-7.
- [10] Попов А.В. // Физика плазмы. 2005. Т 31. №2. С.1-7.

Отыскание собственных значений для функционалов электронной плотности

Попов Виталий Валерьевич

Алтайский Государственный Технический Университет

Кантор Семен Аврамович

sauter@barnaul.ru

Для описания физико-химических свойств молекул, кластеров и твёрдых тел часто используется метод функционала электронной плотности [1,2]. Мощным обоснованием этого метода служит теорема Хоэнберга и Кона [1], которая утверждает, что E - полная энергия многоэлектронной системы является функционалом электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ - фундаментальной переменной, характеризующей поведение рассматриваемой системы. В основном состоянии функционал $E=E(\rho)$ достигает минимума на множестве всех плотностей $\rho(\mathbf{r})$ при условии, что число частиц в системе равно

$$N = \int \rho(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1)$$

Опираясь на метод множителей Лагранжа можно получить следующее уравнение Шредингера

$$\mathbf{F}\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (2)$$

определяющее волновые функции $\psi_i(\mathbf{r})$ и уровни энергии ε_i . Электронная плотность в (1) представляет собой сумму по занятым одноэлектронным состояниям

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{occ} |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (3)$$

Определить вид \mathbf{F} - оператора энергии в (2) не представляет труда

$$\mathbf{F} = \frac{\delta E(\rho)}{\delta \rho(\mathbf{r})}, \quad (4)$$

если явная зависимость $E=E(\rho)$ известна. В этом случае можно считать известной и зависимость $\mathbf{F}=\mathbf{F}(\rho)$. Уравнения (2) являются основой современных расчетов энергетической структуры электронов.

Отметим, что численное решение уравнений (2) для многоатомных систем весьма затруднено, т. к. требует введения очень густой трехмерной сетки из-за особо резких осцилляций решений $\psi_i(\mathbf{r})$ вблизи ядер. Другой вариант практической реализации итерационной процедуры решения (2), предложенный Рутаном, позволяет свести задачу отыскания $\psi_i(\mathbf{r})$ и ε_i к алгебраической проблеме собственных значений

$$\mathbf{FC} = \varepsilon \mathbf{SC} \quad (5)$$

с матричными элементами

$$F_{ij} = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \mathbf{F}(\rho) \varphi_j(\mathbf{r}) d^3r \quad (6)$$

в базисе функций $\varphi_j(\mathbf{r})$. Система функций $\{\varphi_j(\mathbf{r})\}$ должна быть выбрана такой, чтобы конечное число членов ряда

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_j C_{ij} \varphi_j(\mathbf{r}) \quad (7)$$

давало хорошее приближение для $\psi_i(\mathbf{r})$. Если базисные функции не ортонормированы, то матрица интегралов перекрытия \mathbf{S} в уравнении (5) с элементами вида

$$S_{ij} = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) d^3r \quad (8)$$

не является единичной. Наибольшую трудность для практической реализации этого варианта представляет аналитическое вычисление интегралов в (6), поскольку зависимость $\mathbf{F}=\mathbf{F}(\rho)$, как правило, очень сложна. Использование здесь численных методов интегрирования требует введения очень густой трехмерной сетки и поэтому несколько не целесообразнее, чем решение исходной задачи (2) численными методами.

Оказывается, что решение задачи (5) можно свести к алгебраической проблеме собственных значений

$$\mathbf{PC} = \lambda \mathbf{SC} \quad (9)$$

для матрицы \mathbf{P} с элементами только от самой плотности $\rho(\mathbf{r})$:

$$P_{ij} = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) d^3 r \quad (10)$$

и, в соответствии с теоремой Кэли-Гамильтона, представить решение задачи (5) в виде:

$$\mathbf{FC} = F(\lambda)\mathbf{SC} \quad (11)$$

с собственными значениями $\varepsilon = F(\lambda)$.

Таким образом, для вычисления спектра в (2) достаточно: 1) выбрать в качестве базисных функции $\{\varphi_j(\mathbf{r})\}$, такие, чтобы ряд (7) достаточно быстро сходилась, а матричные элементы (8) и (10) на этих функциях можно было вычислить аналитически; 2) найти собственные значения λ_i и функции \mathbf{C}_i обобщенной задачи (9); 3) вычислить спектр $\varepsilon_i = F(\lambda_i)$ по известной зависимости $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\rho)$, определяемой соотношением (4).

Предложенная здесь схема вычисления спектра проверена нами на функционалах [3-5] в приложении к атомам бериллия и железа с базисом функций гауссова типа [6,7] такой же длины, какая обычно используется в атомных расчетах. Для бериллия мы ограничились девятью гауссианами в разложении (7) по сферическим гармоникам степени $l=0$ [6], для железа – четырнадцатью гауссианами степени $l=0$, девятью - степени $l=1$, пятью - степени $l=2$ [7]. Матричные элементы (8) и (10) в этом базисе вычислены аналитически аналогично методу, предложенному в [8]. Обобщенная задача (9) на собственные значения решена численно на основе схемы Хаусхолдера с матрицами девятого порядка для бериллия и шестьдесят шестого – для железа. Найденные затем собственные значения были сопоставлены с результатами численного решения уравнений (2) в приложении к атомам бериллия и железа. Обнаружено совпадение собственных значений в спектре занятых состояний не менее, чем в пяти значащих цифрах.

Отметим, что применение такой схемы особенно эффективно в приложении к молекулам, кластерам и твердым телам, когда аналитическое вычисление интегралов (6) оказывается невозможным без дополнительных предположений или аппроксимаций, численное же интегрирование существенно затруднено из-за резких осцилляций подинтегральных функций, но возможно аналитическое вычисление матричных элементов (8) и (10), например, при использовании базиса функций гауссова типа. При этом точность вычисления спектра, как обычно, определяется полнотой исходного базиса.

Список публикаций:

- [1]. Hohenberg P., Kohn W. // *Phys. Rev.*. V.136. N3. P.884-887. (1964)
- [2]. Kohn W., Sham L. J. // *Phys. Rev.* V.140. N4. P.A1133-A1140 (1965)
- [3]. Barth von U., Hedin L. // *J. Phys. C*. V.5. N13. P.1629-1642 (1972)
- [4]. Vosko S. H., Wilk L., Nusair M. // *Canad. J. Phys.* V.58. N8. P.1200-1215 (1980)
- [5]. Perdew J. P., Wang L. // *Phys. Rev. B*. V.45. N23. P.13244-13249 (1992)
- [6]. Huzinaga S. // *J. Chem. Phys.* V. 42. N4. P.1293-1302 (1965)
- [7]. Wachters A. J. H. // *J. Chem. Phys.* V. 52. N3. P.1033-1036 (1970)
- [8]. Briddon P. R., Jones R. // *phys. stat. sol. (b)*. V.217. P.131-172 (2000)

Температурные поля, иницируемые электромагнитным излучением в неоднородной среде

Поярков Александр Александрович

Стерлитамакская Государственная Педагогическая Академия

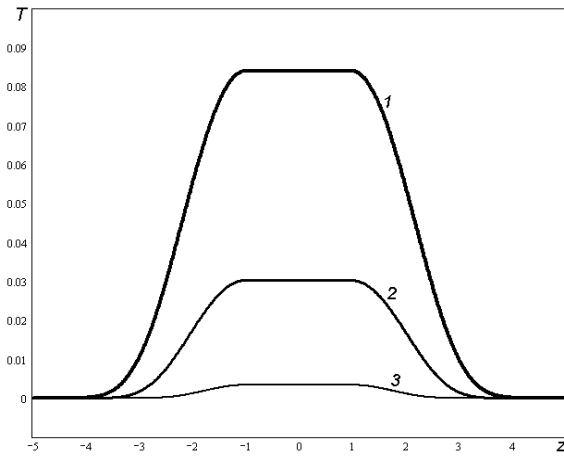
Филиппов Александр Иванович, д.т.н.

deodjen@mail.ru

Важность изучения температурных полей обусловленных электромагнитным воздействием состоит в том, что при таком воздействии происходит разогрев нефтенасыщенной толщи, вследствие которого уменьшается вязкость нефти и становится возможной интенсификация ее добычи.

Работа состоит в обеспечении возможности использования термометрии в нефтяных скважинах, а именно полученные решения позволяют создать новые уточненные методы расчетов температурных полей в нефтесодержащих пластах.

Электромагнитное действие на пласт основано на использовании внутренних источников тепла, возникающих при воздействии высокочастотным электромагнитным полем. Технология метода разработана применительно к скважинному воздействию на пласт во ВНИИ, Башкирском государственном университете и ТатНИИ. Зона действия определяется способом создания, напряженностью и частотой ВЧ электромагнитного поля, а также электрическими свойствами пласта. Она мало зависит от коллекторских свойств. В отличие от стационарного варианта тепловой обработки распределение температуры в пласте слабо зависит от величины притока жидкости в скважину.



Помимо эффектов, связанных с прогревом пласта, электромагнитное воздействие приводит к появлению дополнительных градиентов давления за счет силового взаимодействия электромагнитного поля с пластовой жидкостью.

При расчетах использовались такие параметры среды: плотность породы 876 кг/м^3 , теплоемкость — 1200 Дж/кгК , теплопроводность — 2.64 Вт/мК , диэлектрическая проницаемость — 1 , электрическая проводимость 0.5 См/м , частота излучения диполя — 10^7 Гц .

График зависимости температуры T от координаты z (см. рис.).

Графики соответствуют временам: 1) 7.5 ч, 2) 22 ч, 3) 36 ч при постоянном расстоянии от скважины $r = 0.1 \text{ м}$. из рисунка видно, что температура пласта оказывается большей при воздействии в течение более длительного времени и остается постоянной по всей толще пласта.

Точное решение уравнений комплексного скалярного поля в пространстве-времени Переса

Рассадин Александр Эдуардович
Нижегородский Государственный Университет
Бурланков Дмитрий Евгеньевич, к.ф-м н.
al_ras@pochta.ru

Гравитационные волны были предсказаны А. Эйнштейном еще на заре развития общей теории относительности, однако к настоящему времени получено лишь косвенное подтверждение их существования, поэтому поиск нетривиальных механизмов генерации гравитационного излучения и их экспериментальное наблюдение являются одной из центральных проблем современной теории тяготения.

Поскольку гравитационная постоянная очень мала, то все теоретически предсказываемые эффекты, связанные с гравитационными волнами, чрезвычайно слабы. В силу этого обстоятельства наиболее «популярный» подход к рассмотрению этого круга вопросов состоит в изучении уравнений Эйнштейна, линеаризованных на заданном «фоне».

Если же принять во внимание степень развития прикладной электродинамики на настоящем этапе (сверхсильные магнитные поля, гигантские импульсы лазерного излучения, современные оптические методы и т. д.), то становится очевидным, что главным «претендентом» на роль поля материи, определяющего геометрию «фонового» пространства-времени в рассмотрении такого рода, является электромагнитное поле (возможно, дополнительно взаимодействующее с другими полями материи).

Рассмотрим следующую модель взаимодействия гравитационного и электромагнитного полей с безмассовым комплексным скалярным полем (записанную в планковской системе единиц) [1]:

$$S = \int \left[-\frac{1}{2} R - \frac{1}{4} F_{ij} F^{ij} + \frac{1}{2} (D_i \Phi)(D^i \Phi)^* \right] \sqrt{-g} d^4 x, \quad (1)$$

где $D_i = \nabla_i - ieA_i$, A_i — 4-потенциал и $F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i$ — тензор электромагнитного поля, Φ и Φ^* — компоненты скалярного поля, e — его заряд.

Для получения конкретных решений уравнений движения модели (1) рассмотрим метрику следующего типа :

$$ds^2 = dt^2 - dx^2 + 2 \cdot U(t-x, y, z)(dt - dx)^2 - dy^2 - dz^2 \quad (2)$$

(псевдориманово пространство V_4^3 с метрикой (2) называется пространством-временем Переса), и поля материи вида :

$$\Phi = \Phi(t-x); \quad A_i = (\varphi, -\varphi, 0, 0), \quad \text{причем } \varphi = \varphi(t-x, y, z) \quad (3)$$

(в обычной электродинамике этот выбор соответствует ТЕМ-волне).

Уравнение Клейна-Гордона при таком выборе Φ и A_i удовлетворяется тождественно, т. е. комплекснозначная функция $\Phi(t - x)$ является совершенно произвольной.

Уравнения Эйнштейна благодаря свойствам метрики Переса сводятся к одному уравнению:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + e^2 |\Phi|^2 \varphi^2 + |\Phi'|^2. \quad (4)$$

Уравнения Максвелла также сводятся к одному уравнению:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = e^2 |\Phi|^2 \varphi. \quad (5)$$

Таким образом, геометрия пространства-времени модели (1) для метрики в виде (2) и полей материи (3) определяется системой уравнений (4)-(5). Общее решение этой системы выражается через функции Бесселя мнимого аргумента и функции Макдональда [1].

Для дальнейшего развития данной работы необходимо получить граничные условия для системы (4)-(5). В этом случае гравитационное поле и поля материи модели (1) были бы полностью определены, и их можно было бы использовать в качестве «фоновых» полей для изучения механизма генерации гравитационных волн. Однако в общей теории относительности вопрос о граничных условиях достаточно сложен [2, 3], поэтому на данном этапе, исходя из анализа простейших аксиально-симметричных решений [1], можно лишь отметить, что для распространения волн рассмотренного типа область в плоскости (y, z) должна быть неодносвязной (как и в обычной электродинамике).

Список публикаций:

- [1]. Рассадин А. Э. Об одном точном решении уравнений Эйнштейна-Максвелла-Клейна-Гордона волнового характера. – Тез. докл. Всероссийской НТК «Информационные системы и технологии». — Н. Новгород, 2004.
 [2]. Седов Л. И. Об условиях на сильных разрывах в теории гравитации // ПММ. 1972. Т. 36, с.3.
 [3]. Седов Л. И. О динамических свойствах гравитационных полей // ПММ. 1983. Т. 47, с.180.

Возбуждение и ионизация снаряда при столкновениях быстрых структурных ионов с нейтральными атомами

Рябченко Сергей Васильевич

Гусаревич Евгений Степанович

Поморский Государственный Университет

Матвеев Виктор Иванович, д.ф.-м.н.

ryabchenko.sergey@pomorsu.ru

Частично ободранные ионы высоких зарядов и энергий используются во многих экспериментах, проводимых на ускорителях тяжёлых ионов. Такие ионы состоят из ядра и некоторого количества связанных электронов, частично компенсирующих заряд ядра и образующих электронную шубу иона. Строго говоря, столкновения таких ионов с атомами следует рассматривать как столкновения двух сложных систем, при котором происходит одновременное возбуждение электронных оболочек обеих сталкивающихся систем. В настоящей работе развита непертурбативная теория возбуждения и ионизации быстрых водородоподобных ионов при столкновениях с атомами, причём в отличие от ранее развитых подходов, не делается модельных построений для возмущающего потенциала.

Рассмотрим столкновение движущегося со скоростью \mathbf{v}_p и параметром удара \mathbf{b}_p одноэлектронного снаряда с зарядом ядра Z_p с одноэлектронным атомом с зарядом ядра Z_t , имеющим скорость \mathbf{v}_t и параметр удара \mathbf{b}_t . Обозначим через $\mathbf{R}_t = \mathbf{b}_t + \mathbf{v}_t t$ и $\mathbf{R}_p = \mathbf{b}_p + \mathbf{v}_p t$ – координаты ядер атома-мишени и структурного иона-снаряда соответственно, а через \mathbf{r}_t и \mathbf{r}_p – координаты электронов атома-мишени и структурного иона-снаряда относительно их ядер. Тогда потенциал взаимодействия мишени и снаряда запишется в виде (здесь и везде ниже используются атомные единицы):

$$V(\mathbf{r}_t, \mathbf{r}_p, t) = \frac{Z_p Z_t}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_t|} - \frac{Z_p}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_t - \mathbf{r}_t|} - \frac{Z_t}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_t + \mathbf{r}_p|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_t + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_t|}.$$

Межъядерное взаимодействие, как не вызывающее электронных переходов, далее будем опускать.

При этом временная эволюция начального и конечного состояний имеет вид

$$\Phi_{00}(t) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^t V(\mathbf{r}_t, \mathbf{r}_P, t) dt\right) \Phi_{00}, \quad \Phi_{kn}(t) = \exp\left(-i \int_t^{+\infty} V(\mathbf{r}_t, \mathbf{r}_P, t) dt\right) \Phi_{kn}. \quad (1)$$

Тогда с учётом (1) амплитуда перехода атома-мишени из состояния $\varphi_0(\mathbf{r}_t)$ в состояние $\varphi_n(\mathbf{r}_t)$ и снаряда из состояния $\psi_0(\mathbf{r}_P)$ в состояние $\psi_k(\mathbf{r}_P)$ примет вид

$$A_{0 \rightarrow n}^{0 \rightarrow k} = \langle \Phi_{kn}(t) | \Phi_{00}(t) \rangle = \langle \Phi_{kn} | \exp\left\{-i \int_{-\infty}^{+\infty} V(\mathbf{r}_t, \mathbf{r}_P, t) dt\right\} | \Phi_{00} \rangle, \quad (2)$$

а вероятность перехода, просуммированная по всем конечным состояниям мишени, определится соотношением

$$W_{0 \rightarrow k} = \sum_n |A_{0 \rightarrow n}^{0 \rightarrow k}|^2. \quad (3)$$

В результате получим вероятность перехода снаряда в состояние $\psi_k(\mathbf{r}_P)$ при любой судьбе мишени:

$$W_{0 \rightarrow k} = \frac{2Z_t^3}{\pi} \int d^2 \mathbf{s}_t s_t K_1(2Z_t s_t) \left| \int d^3 \mathbf{r}_P \psi_k^*(\mathbf{r}_P) \exp\left\{\frac{2i}{v} [\ln|\mathbf{b} + \mathbf{s}_P - \mathbf{s}_t| - Z_t \ln|\mathbf{b} + \mathbf{s}_P|]\right\} \psi_0(\mathbf{r}_P) \right|^2. \quad (4)$$

Сечение, соответствующее возбуждению снаряда в любое состояние за исключением основного, будет иметь вид

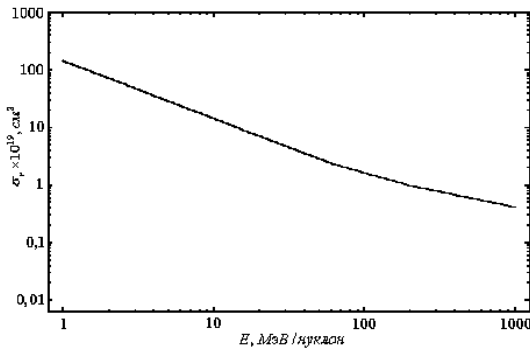


рис. 1

$$\sigma_r = \int d^2 \mathbf{b} (1 - W_{0 \rightarrow 0}(\mathbf{b})). \quad (5)$$

Это выражение учитывает все возможные изменения состояния мишени при столкновении.

Используя формулу (5), было рассчитано полное неупругое сечение σ_r для случая столкновения друг с другом двух атомов водорода ($Z_P = Z_t = 1$). Результаты расчёта представлены на рис. 1.

В случае, когда конечное состояние – есть состояние непрерывного спектра, соответствующее импульсу \mathbf{k} , соответствующее сечение ионизации получается

интегрированием $W_{0 \rightarrow \mathbf{k}}(\mathbf{b})$ по всей плоскости параметров удара и импульсам \mathbf{k} вылетевшего электрона

$$\sigma_i = \int d^2 \mathbf{b} \int d^3 \mathbf{k} W_{0 \rightarrow \mathbf{k}}(\mathbf{b}).$$

Полученное ранее выражение (4) может быть обобщено на случай столкновения водородоподобного иона с многоэлектронным атомом. В этом случае для описания распределения электронной плотности в атоме мишени можно использовать модель Томаса-Ферми или плотность, рассчитанную с помощью аналитических функций Хартри-Фока.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы “Университеты России” (грант ур.01.01.478) и Фонда INTAS-GSI (проект 03-54-4294).

Стохастическое квантование космологических моделей

Савойский Юрий Владимирович

Кабардино-Балкарский Государственный Университет

Хоконов Азамат Хазрет-Алиевич

Yurii.Savoiskii@mail.ru

Одним из основных методов построения функции Грина в теории поля является метод функционального интегрирования позволяющий выразить амплитуду перехода в виде Фейнмановского функционала по путям. В случае, когда выполняется условие квазиклассичности, величина классического действия S заметно превышает 1 (постоянная Планка равна 1) континуальный интеграл предстает собой

Гаусову квадратуру и интегрирование может быть выполнено аналитически. За исключением случая возникновения нулевых мод - инстантонов, затрудняющих вычисления функционального детерминанта. В этой ситуации выделение нулевых мод, и последующее интегрирование по ним удастся осуществить лишь в пределе разреженного инстантоного газа. Однако приближение инстантоного газа существенно нарушается, когда S порядка 1, что соответствует начальной стадии инфляционной космологической модели, в этой ситуации актуальным представляется разработка эффективных методов вычисления континуальных интегралов.

В настоящей работе реализовано вычисление Евклидова континуального интеграла для однородной изотропной Вселенной заполненной скалярным полем. На основе вычисления корреляционных функций выясняется масштаб и характер флуктуаций скалярного поля, и их влияние на эволюцию масштабного фактора.

Оценка эффекта электрогравитатической поляризации проводников сферической формы

Слепцова Ирина Гаврильевна

Якутский Государственный Университет

Степанов Валерий Егорович, д.ф.-м.н.

sigira@mail.ru

Рассчитано воздействие гравитационного поля на электростатическую поляризацию проводников за счет учета массы электронов проводимости. Задача о взаимодействии заряженных проводников формулируется как внешняя задача Дирихле. Суммарный потенциал всех проводников удовлетворяет известному уравнению Лапласа и задаются граничные условия. Потенциал на границах проводников приравняется неизвестным постоянным. Согласно вариационному принципу Дирихле, решение этой задачи эквивалентно минимизации интеграла полной энергии электрического поля взаимодействующих проводников. Учет гравитационного взаимодействия производится добавлением ньютоновской гравитационной энергии самодействия и взаимодействия заряженных оболочек, энергии поля Земли. Далее полная энергия минимизируется по индуцированным мультипольным моментам и задача решается в различных степенях мультипольности приближения.

Полный функционал электрогравитатической энергии двух проводников в форме сферы в проводящем поле Земли будет

$$W = W_{11} + W_{22} + W_{zz} + W_{12} + W_{1z} + W_{2z} \quad (1)$$

где

$$W_{11} = \frac{1}{2} \left(1 - \gamma \left(\frac{m}{e}\right)^2\right) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(Q_l^1)^2}{R_1^{2l+1}} - \gamma \frac{m}{e} q_1 \frac{m_1}{R_1} - \frac{3}{5} \gamma \frac{m_1^2}{R_1} \quad (2)$$

- энергия самодействия первого шара;

$$W_{22} = \frac{1}{2} \left(1 - \gamma \left(\frac{m}{e}\right)^2\right) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(Q_l^2)^2}{R_2^{2l+1}} - \gamma \frac{m}{e} q_2 \frac{m_2}{R_2} - \frac{3}{5} \gamma \frac{m_2^2}{R_2} \quad (3)$$

- энергия самодействия второго шара:

$$W_{12} = \left(1 - \gamma \left(\frac{m}{e}\right)^2\right) \sum_{s=0, l=0}^{\infty} \frac{(l+s)! Q_l^1 Q_s^2}{l! s! L^{s+l+1}} - \gamma \frac{m}{e} m_1 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{Q_l^2}{L^{l+1}} - \gamma \frac{m}{e} m_2 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{Q_l^1}{L^{l+1}} - \gamma \frac{m_1 m_2}{L} \quad (4)$$

- энергия взаимодействия 1 и 2 шара.

Энергия взаимодействия 1 шара с Землей и 2 шара с Землей, соответственно:

$$W_{1z} = -\gamma \frac{m}{e} M_z \sum_{l=0}^{\infty} \frac{Q_l^1}{(L + R_2 + R_z)^{l+1}} \quad (5)$$

$$W_{2z} = -\gamma \frac{m}{e} M_z \sum_{l=0}^{\infty} \frac{Q_l^2}{(R_2 + R_z)^{l+1}} \quad (6)$$

$$W_{zz} = -\frac{3}{5} \gamma \frac{M_z^2}{R_z} \quad (7)$$

(5) – энергия взаимодействия первого шара с Землей;

(6)- взаимодействие второго шара с Землей;

(7) – энергия самодействия Земли, равная $-2,24449 \times 10^{39}$. Она при варьировании этот гравитационный член исчезает.

Рассмотрена задача, когда шары единичного радиуса и единичной массы, соединенные тонкой проводящей нитью, т.е. $q_2 = -q_1 = q$. Расчеты проводились до шестого порядка приближенности.

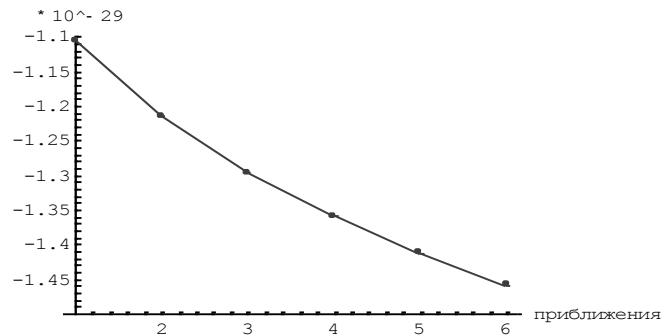


рис.1

Наблюдается монотонное уменьшение энергии (см.рис.1). Расчеты проводились на Mathematica 4.0.

Полный заряд системы равен $Q = q * l + Q_1^1 + Q_1^2$, где l - расстояние между сферами. Равен

$$Q = 8.19584234 * 10^{-15} \text{ (ед. СГС).}$$

Отношение Q к заряду электрона равно $1,7064 \times 10^{-5}$

Условия дифференцируемости полевых функций калибровочной теории дефектов

Степанова Ксения Валерьевна

Якутский государственный университет

Степанов Валерий Егорович, д.ф.-м.н.

spinor@rambler.ru

Полевыми функциями классической теории упругости являются компоненты вектора смещения $u_\alpha, \alpha=1,2,3$, определяющего тензор деформации

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x^\alpha} u_\beta - \frac{\partial}{\partial x^\beta} u_\alpha \right) = \frac{1}{2} (\partial_\alpha u_\beta - \partial_\beta u_\alpha) \quad (1)$$

Частные производные компонент тензора деформации состоят из комбинаций вторых частных производных. Условия дифференцируемости первых частных производных функций выражаются как условия независимости их вторых частных производных от порядка дифференцирования. Для вторых частных производных от компонент тензора деформации существует единственное уравнение, превращающееся в тождество при подстановке условий (1) и оно известно как условия совместности Сен-Венана классической теории упругости

$$\partial_{mn}^2 u_{kl} + \partial_{kl}^2 u_{mn} - \partial_{ln}^2 u_{km} - \partial_{km}^2 u_{ln} = 0 \quad (2)$$

В калибровочной теории дефектов Голембевской-Лясоты [1] в уравнении (1) частные производные заменяются на ковариантные производные относительно общей аффинной связности.

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\nabla_{\alpha}u_{\beta} + \nabla_{\beta}u_{\alpha}) \quad (3)$$

При этом кручение связности описывает дислокации, а тензор кривизны соответствует дисклинациям, ковариантные производные от метрического тензора, выражаемые как комбинация с вектором Вейля соответствуют точечным дефектам [1]. Ковариантное обобщение условий совместности Сен-Венана получается при замене частных производных на симметризованные комбинации ковариантных производных:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \left[\nabla_m \nabla_n (\nabla_k u_l + \nabla_l u_k) + \nabla_n \nabla_m (\nabla_k u_l + \nabla_l u_k) + \nabla_k \nabla_l (\nabla_m u_n + \nabla_n u_m) + \nabla_l \nabla_k (\nabla_m u_n + \nabla_n u_m) - \right. \\ & \left. - \nabla_l \nabla_n (\nabla_k u_m + \nabla_m u_k) - \nabla_n \nabla_l (\nabla_k u_m + \nabla_m u_k) - \nabla_k \nabla_m (\nabla_l u_n + \nabla_n u_l) - \nabla_m \nabla_k (\nabla_l u_n + \nabla_n u_l) \right] = \\ & = 2(\nabla_m R_{knl}^{\sigma} + \nabla_k R_{mln}^{\sigma} + \nabla_n R_{lmk}^{\sigma} + \nabla_l R_{nkm}^{\sigma}) u_{\sigma} + (2R_{knl}^{\sigma} + R_{lnk}^{\sigma} + R_{kln}^{\sigma}) \nabla_m u_{\sigma} + (2\nabla_m S_{kn}^{\sigma} + R_{nnk}^{\sigma}) \nabla_{\sigma} u_l + 2S_{kn}^{\sigma} \nabla_m \nabla_{\sigma} u_l + \\ & + (2R_{mln}^{\sigma} + R_{mnl}^{\sigma} + R_{nlm}^{\sigma}) \nabla_k u_{\sigma} + S_{mn}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_k u_l + (2\nabla_n S_{lm}^{\sigma} + R_{nml}^{\sigma} + R_{lnm}^{\sigma}) \nabla_{\sigma} u_k + (2R_{nkm}^{\sigma} + R_{nmk}^{\sigma} + R_{mkn}^{\sigma}) \nabla_l u_{\sigma} + \\ & (2R_{lmk}^{\sigma} - R_{klm}^{\sigma}) \nabla_n u_{\sigma} + 2S_{lm}^{\sigma} \nabla_n \nabla_{\sigma} u_k + S_{ln}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_m u_k + (2\nabla_k S_{ml}^{\sigma} + R_{klm}^{\sigma} + R_{mkl}^{\sigma}) \nabla_{\sigma} u_n + 2S_{ml}^{\sigma} \nabla_k \nabla_{\sigma} u_n - S_{lk}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_m u_n + \\ & + S_{mk}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_l u_n + (2\nabla_l S_{nk}^{\sigma} + R_{lkn}^{\sigma} + R_{nlk}^{\sigma}) \nabla_{\sigma} u_m - S_{kl}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_n u_m + S_{nl}^{\sigma} \nabla_{\sigma} \nabla_k u_m + 2S_{nk}^{\sigma} \nabla_l \nabla_{\sigma} u_m \end{aligned} \quad (4)$$

Эти условия являются условиями дифференцируемости первых частных производных тензора деформации в калибровочной теории дефектов и должны дополняться тождествами Бианки-Падова первого рода:

$$R_{rsk}^i + R_{skr}^i + R_{krs}^i = \nabla_r S_{sk}^i + \nabla_s S_{kr}^i + \nabla_k S_{rs}^i - S_{rs}^p S_{kp}^i - S_{sk}^p S_{rp}^i - S_{kr}^p S_{sp}^i \quad (5)$$

и второго рода пространства аффинной связности [2]:

$$\nabla_t R_{rsk}^i + \nabla_r R_{stk}^i + \nabla_s R_{trk}^i = S_{tr}^m R_{smk}^i + S_{rs}^m R_{tmk}^i + S_{st}^m R_{rkm}^i \quad (6)$$

Список публикаций:

[1]Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. – М.: Мир, 1987.

[2]Норден А.П. Пространства аффинной связности. – М.: Наука, 1976.

О нижнем граничном условии для задачи промерзания оттаивания в двумерном случае

Ткаченко Евгений Иванович

Тюменский Государственный Университет

Даниэлян Юрий Саакович д.ф.-м.н.

tkachenko @hotbox.ru

Особые природные и экономические условия районов распространения вечномерзлых грунтов определяют специальные требования к проектированию, строительству и эксплуатации сооружений. При строительстве в условиях сурового климата повышаются требования к теплозащитным качествам применяемых материалов и разрабатываемых проектных решений. Отсюда следует необходимость увеличения точности расчетов, а также максимально возможный учет факторов влияющих на процессы теплообмена, таких как неоднородности геологического строения грунтов, нестационарности теплофизических процессов и т.д. Все выше перечисленное переводит проблему в разряд нерешаемых аналитически.

При решении задач промерзания – оттаивания грунтов в ограниченных областях, основная неясность математической постановки задачи касается формулировки условия на нижней границе рассматриваемой области. С точки зрения физики, задание постоянной температуры или теплового потока является некорректным, так как не соответствует никаким реальным физическим процессам на этой границе, а является искусственным способом замыкания математической постановки задачи.

В докладе излагается один из путей к решению этой проблемы, позволяющей получить точное выражение для краевого условия на нижней границе рассматриваемой области в случае двумерной постановки задачи. Полученное соотношение можно использовать для аналитических и численных методов решения.

Однако, всего вышеизложенного достаточно лишь для того чтобы более корректно рассчитывать сезонное температурное поле грунта. В случае расчета ореола оттаивания под тепловыделяющим сооружением, необходимо задавать начальные условия в виде конкретных функций, что незамедлительно скажется на форме записи нижнего граничного условия.

Особенность постановки задачи состоит в том, что область решения уравнения теплопроводности лежит ниже границы сезонного промерзания или оттаивания, следовательно, оно является линейным, так как фазовых превращений определяющих нелинейность задачи не происходит.

Способ получения точного выражения для нижнего граничного условия заключается в последовательном выполнении следующих операций:

1) первый шаг это преобразования Лапласа по переменной x (глубина) и по времени, которые позволяют свести исходное уравнение:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

к одномерному дифференциальному уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами;

2) далее находим в пространстве изображений решение полученного уравнения;

3) затем вычисляется производная на границе;

4) после чего совершаем обратный переход из пространства изображений в пространство оригиналов.

Полученное соотношение связывает функцию и ее пространственную производную на границе:

$$\int_0^t \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\pi * (t - \tau)}} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial T(x, \tilde{y}, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=0} * \frac{1}{2 * \sqrt{a\pi}} \exp\left(-\frac{(y - \tilde{y})^2}{4 * a(t - \tau)}\right) d\tilde{y} + T(x, y, t) \Big|_{x=0} - \frac{1}{4 * \sqrt{a * t * \pi}} * \int_{-\infty}^{\infty} T(x, \tilde{y}) * \exp\left(-\frac{(y - \tilde{y})^2}{4 * a * t}\right) d\tilde{y} \Big|_{x=0} = 0, \quad (2)$$

где $T(x, y)$ распределение температур в начальный момент времени.

В докладе обсуждаются пути и проблемы, связанные с применением полученного условия в практических задачах.

Расчет температурных полей при фильтрационно-волновом нагреве

Хисматуллин Азат Салаватович

Стерлитамакская Государственная Педагогическая Академия

Филиппов Александр Иванович, д.т.н.

Hism5az@rambler.ru

При фильтрация нефти через пористый пласт в непостоянном поле давления происходит увеличение его температуры [1]. Этот эффект можно использовать для увеличения пористости пласта, очищая его от отложенного на порах парафина. В работе изучается зависимость температурных полей в пористых пластах при воздействии на них периодически изменяющимся давлением.

Постановка задачи. Рассмотрим задачу об изменении температуры флюида при колебательном движении в пористой среде с учетом фазовых переходов, обусловленных растворением парафина. Пусть горизонтальный пласт представлен в виде трех полубесконечных областей, с плоскими границами раздела, перпендикулярными оси z ($z = \pm h$, рис.1). Первая I и вторая II области непроницаемы; средняя область толщины $2h$, расположенная горизонтально, является пористой и насыщена парафинистой нефтью. Будем рассматривать случай радиального колебательного движения парафинистой нефти в средней области $-h < z < h$. При описании температурной задачи примем, что температура нефти, парафина и скелета пористой среды в каждой точке совпадают, отлична от нуля только радиальная координата скорости конвективного переноса тепла, т.е. $U_r \neq 0$, $U_\phi = 0$, $U_z = 0$.

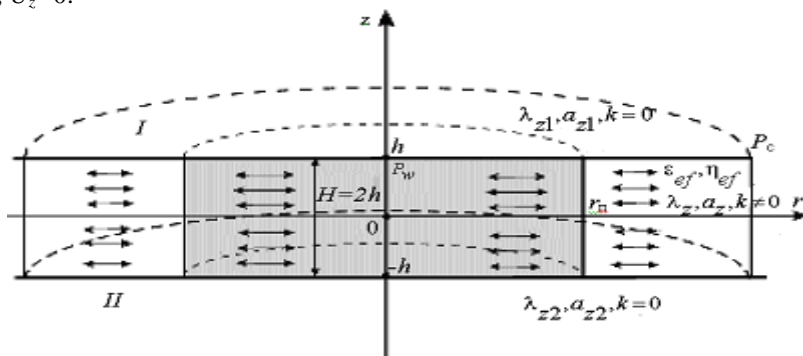


рис.1. Фильтрация парафинистой нефти. Геометрия задачи: I – покрывающие породы, II – подстилающие породы, r_n – радиус зоны парафинистых отложений, R_c – радиус контура питания

Математическая постановка задачи для первой и второй областей представляется уравнением теплопроводности, а для средней области – уравнением баротермического эффекта, учитывающего вклад фазовых переходов за счет парафинизации (депарафинизации). Задача решена с использованием модификации асимптотического метода [2]. Построены графики зависимости баротермического эффекта от времени для парафинистой нефти при разных значениях проницаемости пористой среды (плоскорадийальный случай), температуры в пласте от времени (без учета теплообмена и с учетом теплообмена с окружающими пласт породами), температуры от безразмерной координаты z .

Список публикаций:

- [1]. Филиппов А.И., Ефимова Г.Ф. Теория баротермического эффекта в жидкости с учетом теплопроводности в одномерном случае // Теплофизика высоких температур. Т. 35. №4.1997. С. 560 -563.
 [2]. Филиппов А.И., Хисматуллин А.С. Фильтрационно-волновой нагрев нефтяного пласта // Современные проблемы физики и математики. Т.2. Уфа: Гилем, 2004. С.114-130.

Релаксационные особенности сигналов магнитоэнцефалограммы (МЭГ) человека при фоточувствительной эпилепсии

Хусаенова Эндже Вагизовна

Казанский Государственный Педагогический Университет

Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.

KhusaenovaEndze@mail.ru

В последнее время особую актуальность приобретают проблемы исследования человеческого организма и отдельных систем его жизнедеятельности. Для исследования динамических состояний головного мозга человека, как правило, используются методы электроэнцефалограммы (ЭЭГ), магнитоэнцефалограммы (МЭГ), рентгеновской томографии и др. Они позволяют получить лишь отдельные показатели общих и локальных физиологических и патологических изменений функционального состояния мозга человека. Однако эти медицинские способы исследования головного мозга дают недостаточную информацию о свойствах и закономерностях, связанных с физической интерпретацией различных динамических состояний головного мозга. В настоящее время широко используются статистические методы анализа экспериментальных данных, которые учитывают физическую природу процессов, протекающих в человеческом организме. Предлагаемый нами метод диагностики и анализа электрических сигналов коры головного мозга базируется на основных понятиях и положениях статистической теории дискретных немарковских случайных процессов [1]. Учет дискретности, нестационарности, эффектов немарковости, короткодействующей и далекодействующей памяти открывает принципиально новые возможности в исследовании человеческого организма и головного мозга, в частности. Наблюдение эффектов немарковости в стохастической динамике электрических сигналов коры головного мозга человека позволяет выявить качественные и количественные различия динамических состояний больных и здоровых людей и оценить любые внутренние изменения, происходящие в головном мозге и в центральной нервной системе человека.

В качестве экспериментальных данных мы использовали временные записи МЭГ человека [2]. Визуально вызванные магнитные ответы были зарегистрированы с помощью 61 квантового детектора (SQUID). В исследовании участвовало 10 человек: девять здоровых людей и один больной с фоточувствительной эпилепсией. Регистрация временных записей осуществлялась при трех разных стимулах, которые состояли из следующих цветных комбинаций: красно-синий (R\B), сине-зеленый (B\G), красно-зеленый (R\G). Во время испытаний пациенты с минимальным движением глаз наблюдали визуальные стимулы, производимые двумя видеопроекторами.

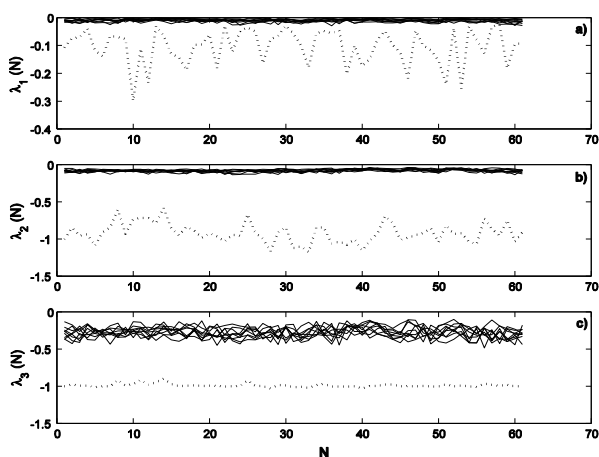


рис. 1

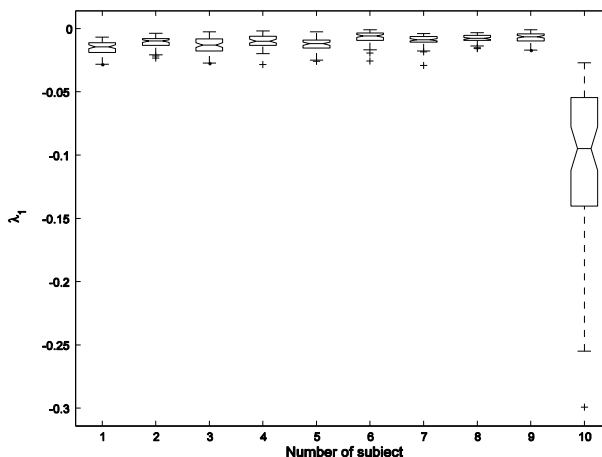


рис. 2

На *рис. 1,2* представлена найденная нами зависимость релаксационных параметров λ_i ($i=1,2,3$) от номера квантового детектора (*рис. 1*) и номера субъекта (*рис. 2*). Параметр $|\lambda_i|$ определяет скорость релаксации на i -ом уровне релаксации. Из графиков видно, что значения параметров λ_i ($i=1,2,3$) для здоровых людей (сплошная линия) и для больного фоточувствительной эпилепсией (штриховая линия) сильно различаются. Данные показывают, что скорость релаксации здоровых людей меньше, чем скорость релаксации больного эпилепсией, в среднем, в 11 - 12 раз. При некоторых условиях это различие достигает 20 - кратного значения.

Предлагаемый метод исследования электрических сигналов коры головного мозга человека основан на анализе ортогональных динамических переменных, их фазовых траекторий, частотных спектров функций памяти, спектра параметра немарковости и локальных кинетических и релаксационных параметров. Проведенные исследования показали, что учет дискретности, нестационарности, эффектов немарковости, короткодействующей и дальнодействующей памяти позволяют уловить тонкие специфические характеристики в поведении сложных систем, которые недоступны при использовании других методов. Данный метод можно использовать не только для анализа, диагностики и прогнозирования динамики электрических сигналов коры головного мозга, но и для решения других практических задач современной нейрофизиологии.

Список публикаций:

[1]. R.M. Yulmetev, P. Hõnggi, F. Gafarov, *Phys. Rev. E*, 62 (5) (2000).

[2]. J. Bhattacharya, K. Watanabe, S. Shimojo, *International Journal of Bifurcation & Chaos*, Vol. 14(8), August 2004.

Связанные магнитоупругие волны в двухподрешеточном антиферромагнетике MnF_2

Хусаинов Айдар Танаевич

Кызыргулов Ильгиз Раянович

Бакирский Государственный Университет

Кызыргулов Ильгиз Раянович, к. ф.-м. н.

KizirulovIR@mail.ru

В настоящее время резко возрос интерес к исследованию магнитных свойств солей переходных металлов (Zn, Fe, Ir и т.д.), обладающих большим практическим потенциалом. Именно в этой области ведется поиски высоко температурных сверхпроводников [1] в последнее время. К таким интересным соединениям безусловно относится и кристалл дифторида марганца MnF_2 .

В данной работе рассматривается взаимодействие спиновых и упругих волн в кристалле MnF_2 в тетрагональной фазе с антиферромагнитным дальним порядком, имеющем ярко выраженную коллинеарную антиферромагнитную структуру с двумя подрешетками (стрелками показано направление собственных магнитных моментов атомов) (см. *рис.1*):

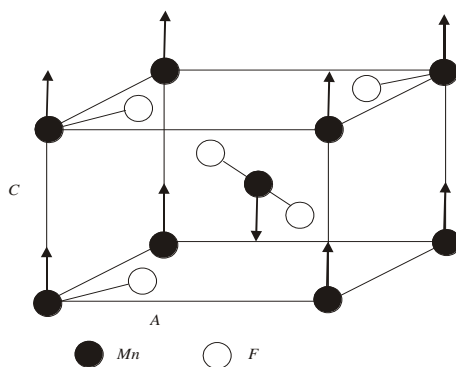


рис. 1. Магнитная структура MnF_2 .

Заметим, при построении модели MnF_2 надо учитывать следующие особенности этого материала [2]:

1. MnF_2 имеет объемноцентрированную тетрагональную структуру, которая изображена на (*рис.1*) ($a = 4,87E$; $c = 3,31E$).
2. Основными обменными взаимодействиями в этом материале является слабое ферромагнитное взаимодействие вдоль направления $[001]$ ($\sigma = 0,3 \pm 0,1K$) и антиферромагнитное взаимодействие вдоль направления $[111]$ ($\sigma = -1,76K$). Обменное взаимодействие вдоль направлений $[100]$ и $[010]$ близко к нулю. Таким образом, взаимодействие между ближайшими соседями (вдоль оси c) оказывается намного меньше, чем взаимодействие центрального спина со спинами в углах решетки.

3. Существенную роль в MnF_2 может играть одноосная анизотропия типа «легкая ось», которая в материале имеет высокую величину ($\frac{\beta}{\delta} \cong 1,6 * 10^{-2}$).

При описании антиферромагнетика мы исходим из гамильтониана, в котором учитывается энергия магнитной (H_M), упругой (H_U), частей системы и энергия их взаимодействия (H_{MU}):

$$H = H_M + H_U + H_{MU} \quad (1)$$

В гамильтониане магнитной подсистемы во внешнем поле учтены энергии однородного и неоднородного обменных и релятивистских взаимодействий, упругая подсистема рассмотрена в гармоническом приближении.

Гамильтониан (1) рассматривается в представлении вторичного квантования, в котором магнитные моменты M выражались через операторы Гольштейна-Примакова и вектор упругих смещений u — через соответствующие операторы рождения и уничтожения [3].

Методом приближенного вторичного квантования и канонических преобразований Н.Н.Боголюбова были найдены спектры спиновых и упругих волн, а также константы магнитоупругого взаимодействия:

$$H = \sum_{f,k} \varepsilon^M a_{fk}^+ a_{fk} + \sum_{s,k} w_{sk}^U b_{sk}^+ b_{sk} + \sum_{ks} \Psi_{ks}^{MU} c_k [b_{-ks} - b_{ks}^+], \quad (2)$$

Найдено дисперсионное уравнение, определяющее собственные частоты связанных магнитоупругих волн в кристалле антиферромагнетика MnF_2

$$(\varepsilon_M^2 - \omega^2)(\varepsilon_M^1 - \omega^2)(\varepsilon_U^{pr} - \omega^2)(\varepsilon_U^{1po} - \omega^2)(\varepsilon_U^{2po} - \omega^2)(\omega_t^2 - \omega^2) + 4 \prod_{a,b=1}^6 \varepsilon_a^b \omega_t (\varepsilon_a^b - \omega^2) \sum_{c \neq a,b} |\gamma_{ab}|^2 = 0 \quad (3)$$

Было проведено исследование константы магнитоупругого взаимодействия в зависимости от направления распространения волны. Исследования показали, что при $\vec{k} // OZ$ усиливается связь второй магнитной ветви с первой поперечной ветвью в $\sqrt{\delta}$ раз. При $\vec{k} // OY$ усиливается связь первой магнитной ветви со второй поперечной ветвью в $\sqrt{\delta}$ раз, а при $\vec{k} // OX$ — связь второй магнитной ветви со второй поперечной ветвью в $\sqrt{\delta}$ раз, где δ — параметр обменной связи.

Список публикаций:

- [1] Савченко М.А., Стефанович А.В., Харрасов М.Х. *Высокотемпературная сверхпроводимость магнитокерамических систем*. Уфа: Китап, 1997. 54 с.
 [2] De Jongh L.J., Miedema A.R. *Adv.Phys.* V.23. №1. P.1-260, (1974).
 [3] Савченко М.А., Хабахпашев М.А. //ФТТ. Т.18. В.9.С.2699-2703.1976.
 [4] Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Камилев И.К., Абакирова П.Ш., Адиева С.Н. *Статические критические свойства модели реального антиферромагнетика MnF_2* . Сборник трудов VI Международного семинара. Махачкала. 2004. С. 756-759.