

Volume 2 • Number 2 • 2015

ISSN 2312-4334

East European Journal of Physics



V.N. Karazin Kharkiv National University Publishing

ISSN 2312-4334

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

East European Journal of Physics

Volume 2 · Number 2

2015

East European Journal of Physics

EEJP is an international peer-reviewed journal devoted to experimental and theoretical research on the nuclear physics, cosmic rays and particles, high-energy physics, solid state physics, plasma physics, physics of charged particle beams, plasma electronics, radiation materials science, physics of thin films, condensed matter physics, functional materials and coatings, medical physics and physical technologies in an interdisciplinary context.

Published quarterly in hard copy and online by Karazin Kharkiv National University Publishing.

ISSN 2312-4334 (Print), ISSN 2312-4539 (Online)

The editorial policy is to maintain the quality of published papers at the highest level by strict peer review.

Approved for publication by the Academic Council of the Karazin Kharkiv National University (July 1, 2015, protocol No.7)

Editor-in-Chief

Azarenkov N.A., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Deputy editor

Girka I.O., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Executive Secretary

Girnyk S.A., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Editorial Board

Adamenko I.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Akulov V.P., City University of New York, USA

Antonov A.N., Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria

Barannik E.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Beresnev V.M., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Berezhnoy Yu.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Bizyukov A.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Bragina L.L. STU Kharkiv Polytechnical Institute, Ukraine

Broda B., University of Lodz, Poland

Budagov Yu.A., Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia

Dovbnya A.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Dragovich B.G., University of Belgrade, Serbia

Duplij S.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Garkusha I.E., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Gofman Yu., Jerusalem College of Technology, Israel

Grekov D.L., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Karnaukhov I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Khodusov V.D., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Kondratenko A.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Korchin A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Krivoruchenko M.I., Institute for Theoretical and Experimental Physics, Moscow, Russia

Lavrinenko S.D., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Lazurik V.T., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Mel'nik V.N., Institute of Radio Astronomy, Kharkiv, Ukraine

Merenkov N.P., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Neklyudov I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Noterdaeme J.-M., Max Planck Institute for Plasma Physics, Garching, Germany

Nurmagambetov A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Onyschenko I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Ostrikov K.N., Plasma Nanoscience Centre Australia, Clayton, Australia

Peletminsky S.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Pilipenko N.N., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Radinschi I., Gheorghe Asachi Technical University, Iasi, Romania

Slyusarenko Yu.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Smolyakov A.I., University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada

Shul'ga N.F., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Tkachenko V.I., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Voyevodin V.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Yegorov O.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Editorial office

Department of Physics and Technologies

Karazin Kharkiv National University

Kurchatov av., 31, office 402, Kharkiv, 61108

Ukraine

Tel: +38-057-335-18-33

E-mail: eejp@karazin.ua

Web-pages: <http://eejp.univer.kharkov.ua>, <http://periodicals.karazin.ua/eejp> (Open Journal System)

Certificate of State registration No.20644-10464P, 21.02.2014

East European Journal of Physics

Volume 2

Number 2

2015

REVIEWS

- Essential features of models for description of modulation instability of Langmuir waves in plasma** 4
A.V. Kirichok, V.M. Kuklin, A.G. Zagorodny
- Compact linear ion accelerator to small and average energy of application appointment** 20
S.A. Vdovin, Ye.V. Gussev, M.G. Shulika

ORIGINAL PAPERS

- Destruction of Bernard cells under local irregularities of thermal equilibrium and their forming over the Bernard cells** 30
L.S. Bozbiei, A.O. Kostikov, V.I. Tkachenko
- Calculation of (e⁺,e⁻) pair contribution to the spectra of electrons scattered by nuclei** 38
I.S. Timchenko, A.Yu. Buki
- Emittance's influence on transverse dynamics of the accelerated bunches in plasma-dielectric wake field accelerator** 44
R.R. Kniaziev
- Modeling of amyloid fibril binding to the lipid bilayer** 51
V. Trusova
- About conditions of existence of second sound waves in isotopically enriched crystals ⁷LiF** 59
V.D. Khodusov, A.S. Naumovets
- Method of correlation functions for dense gases and liquids** 65
Yu.M. Poluektov
- Choice of conditions for gas outflow in vacuum and configurations of a forming unit feeding a working substance into the plasma volume** 81
Yu.V. Kovtun, A.N. Ozerov, E.I. Skibenko, V.B. Yuferov
- Application of ⁴He²⁺ and ³He²⁺ beams of the compact accelerator "SOKOL" for ion beam analysis** 90
S.G. Karpus, V.N. Bondarenko, A.V. Goncharov, L.S. Glazunov, A.V. Zats, V.V. Kuz'menko, V.M. Pistryak, V.I. Sukhostavets

PACS: 52.40.Mj, 52.35.Mw

ESSENTIAL FEATURES OF MODELS FOR DESCRIPTION OF MODULATION INSTABILITY OF LANGMUIR WAVES IN PLASMA

A.V. Kirichok¹⁾, V.M. Kuklin¹⁾, A.G. Zagorodny²⁾

¹⁾*Kharkov National University, Institute for High Technologies
4 Svobody Sq., Kharkov 61022, Ukraine*

²⁾*Bogolyubov Institute for Theoretical Physics
14-b, Metrolohichna str., Kiev, 03680, Ukraine*

E-mail: artif.intel@karazin.ua

Received April 4, 2015

Various models for description of the modulation instability of intensive Langmuir oscillations in plasma in one-dimensional representation are discussed. It is noted that the kinetic damping on the electrons can violate the conditions of the modulation instability development due to the suppression of the field at the stage of cavities formation, which in this case can reshape. The hydrodynamic model not quite correctly describes the behavior of particles trapped by the spatially inhomogeneous field, neglecting in fact by their inertia that leads to formation of not only very small-scale and deep plasma density cavities, but also triggers to the peaking regime. Considering ions as particles within framework of so-called hybrid models (when electrons are described as fluid and ions as super-particles) allows to see the appearance of groups of fast ions and premature collapse of density cavities due to the intersection of ion trajectories. These models make possible determination of the energy transmitted to ions and low-frequency collective degrees of freedom. Different models are compared with special emphasis on the comparative dynamics of ion heating with development of the instability of intensive Langmuir oscillations in hot (Zakharov's model) and cold (Silin's model) plasma.

KEYWORDS: modulation instability, parametric instability, Zakharov's model, Silin's model, hybrid models

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛЕЙ ОПИСАНИЯ МОДУЛЯЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ВОЛН В ПЛАЗМЕ

А.Г. Загородний¹⁾, А.В. Киричок²⁾, В.М. Куклин²⁾

¹⁾*Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
ул. Метрологическая, 14 – Б, Киев 03680, Украина*

²⁾*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
пл. Свободы, 4, Харьков 61022, Украина*

Обсуждаются различные модели описания модуляционной неустойчивости интенсивных ленгмюровских колебаний в плазме при использовании одномерного представления. Отмечается, что кинетическое затухание на электронах способно нарушить условия развития модуляционной неустойчивости за счет подавления поля еще на этапе формирования каверн, которые при этом могут искажать свою форму. Гидродинамическое описание не вполне корректно описывает поведение захваченных частиц неоднородным в пространстве полем, фактически пренебрегая их инерцией, что формирует не только весьма мелкомасштабные и глубокие каверны плотности плазмы, но и режимы с обострением. Представление ионов частицами в рамках, так называемых гибридных моделей (электроны описаны гидродинамически, а ионы – крупными частицами), позволяет увидеть появление групп быстрых ионов и преждевременное разрушение каверн плотности из-за пересечения их траекторий. Подобные модели позволяют найти энергию, передаваемую ионам и коллективным НЧ степеням свободы. Проводится сравнение различных моделей, причем особое внимание уделяется обсуждению сравнительной динамики нагрева ионов при неустойчивости интенсивных ленгмюровских колебаний в горячей (модель Захарова) и холодной (модель Силина) плазме.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: модуляционная неустойчивость, параметрическая неустойчивость, модель Захарова, модель Силина, гибридные модели

ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЕЙ ОПИСУ МОДУЛЯЦІЙНОЇ НЕСТІЙКОСТІ ЛЕНГМЮРІВСЬКИХ КОЛИВАНЬ У ПЛАЗМІ

А.Г. Загородній¹⁾, О.В. Киричок²⁾, В.М. Куклін²⁾

¹⁾*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
вул. Метрологічна, 14 – Б, Київ 03680, Україна*

²⁾*Харківський національний університет ім. В.М. Каразіна
пл. Свободи, 4, Харків 61022, Україна*

Обговорюються різні моделі опису модуляційної нестійкості інтенсивних ленгмюровських коливань в плазмі в одномірному випадку. Відзначається, що кінетичне згасання на електронах здатне порушити умови розвитку модуляційної нестійкості за рахунок заглушення поля ще на етапі формування каверн, які при цьому можуть змінювати свою форму. Гідродинамічний опис не цілком коректно описує поведінку захоплених частинок неоднорідним в просторі полем, фактично нехтуючи їх інерцією. Це приближення має наслідком не тільки формування дрібномасштабних та глибоких каверн густини плазми, але і перехід до режимів з загостренням. Представлення іонів частками в рамках, так званих гібридних моделей (електрони описуються як рідина, а іони як великі частинки), дозволяє побачити появлення груп швидких іонів і передчасне руйнування каверн густини через перетин іонних траекторій. Подібні моделі дозволяють знайти загальну енергію, що передається іонам та колективним НЧ ступеням свободи. Проводиться порівняння різних моделей, причому особлива увага приділяється обговоренню порівняльної динаміки нагріву іонів при нестійкості інтенсивних ленгмюровських коливань в

горячий (модель Захарова) і холодний (модель Силіна) плазмі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: модуляційна нестійкість, параметрична нестійкість, модель Захарова, модель Силіна, гібридні моделі

Легко возбуждаемые различными источниками в плазме [1–9] интенсивные ленгмюровские волны оказываются параметрически неустойчивыми. Эта неустойчивость ведет к возбуждению коротковолнового спектра колебаний, синхронизированного по частоте с интенсивной ленгмюровской волной (накачки), и к образованию глубоких каверн плотности плазмы, заполненных ВЧ полем. Интерес к этим процессам был обусловлен, в частности, открывшимися возможностями нагрева электронов и ионов. Корректный аппарат описания параметрической неустойчивости длинноволновых ленгмюровских колебаний фактически был создан в основополагающих работах В.П. Силина [10] и В.Е. Захарова [11]. Уже в первых численных 1D экспериментах по параметрическому распаду ленгмюровских колебаний [12] эти теоретические представления были подтверждены [10] (см. также [13,14] и обзор [15]). Однако наибольший интерес у экспериментаторов вызвал обнаруженный В. Е. Захаровым механизм диссипации волновой энергии. Аналитические исследования, аппаратные и численные эксперименты еще на ранней стадии изучения этих явлений подтвердили [16–18] тот факт, что в некоторых случаях заметная часть энергии поля накачки в результате неустойчивости переходит в энергию коротковолнового ленгмюровского спектра [19,20] и появляются выбросы быстрых частиц [16–29].

Если плотность энергии длинноволнового ленгмюровского поля меньше плотности тепловой энергии электронов плазмы, процесс формирования коротковолнового спектра возмущений и образования каверн плотности плазмы может быть описан с помощью уравнений Захарова [11], полученных с использованием гидродинамических уравнений для электронной и ионной жидкостей. В гидродинамической модели Захарова возникают области локализации интенсивных электрических ВЧ полей. Из этих областей (каверн) плазма выталкивается под действием ВЧ-давления, так что плотность плазмы оказывается значительно ниже средней по объему. Дальнейшая эволюция может привести к так называемому коллапсу – сужению и углублению каверны плотности (т.н. режим с обострением). В этом случае сужение каверны, как может быть замечено в более общих моделях описания этого явления, должно сопровождаться затуханием мелкомасштабных мод ВЧ спектра на электронах и «схлопыванием» каверны из-за выгорания ВЧ поля (так называемый, «физический коллапс»). Понятно, что в гидродинамической модели учет ряда кинетических эффектов (например, затухания Ландау) невозможен. Поэтому обычно применяются феноменологическое описание этого явления, за счет введения в систему гидродинамических уравнений соответствующих слагаемых. Это в определенной степени допустимо, ибо природа затухания Ландау достаточно хорошо изучена. С другой стороны, чисто гидродинамическое описание, не вполне корректно описывает поведение захваченных частиц неоднородным в пространстве полем, фактически пренебрегая их инерцией (существенной именно для ионов), что приводит к формированию не только весьма мелкомасштабных и глубоких каверн плотности плазмы, но и к режимам с обострением, которые не вполне адекватны физической реальности.

Для корректного учета затухания Ландау на электронах часто используется кинетическое уравнение для функции их распределения. Но следует иметь в виду, что при определенных условиях кинетическое затухание на электронах способно нарушить условия развития модуляционной неустойчивости за счет подавления поля еще на этапе формирования каверн, которые при этом могут искажать свою форму. То есть, существуют трудности в интерпретации процесса модуляционной неустойчивости, характер которой может довольно заметно изменяться при включении сильного кинетического затухания. Кроме того, кинетический подход, как и гидродинамический, описывает движение сплошной среды, позволяя существовать не имеющим физической перспективы решениям с обострениями вплоть до сколь угодно малых масштабов.

Ниже обсудим различные модели описания модуляционной неустойчивости интенсивных ленгмюровских колебаний в плазме, используя одномерное представление. Выбор одномерных моделей процессов, как отметил Дж. Доусон, сохраняет основные черты процессов, существенно упрощая описание и понимание физических явлений [30].

В одномерном случае формируется мелкомасштабная солитоноподобная каверна, где ВЧ давление уравновешивается давлением плазменных электронов. В дозвуковом режиме действительно формируются решения в виде цуга солитонов, подобные тем, которые являются решениями нелинейного уравнения Шредингера [31]. Однако в этих низкоразмерных случаях возможен «физический коллапс», если ВЧ давление уменьшается в результате выгорания поля за счет затухания Ландау [32].

Вообще говоря, поддерживает разрушение каверны нагрев не только электронов, но и ионов, повышающий общее давление плазмы, что также разрушает равновесное состояние этих образований. В сверхзвуковом режиме движения стенок каверны, вероятность физического коллапса даже в одномерном случае может возрастать. Модуляционная неустойчивость интенсивной ленгмюровской волны в неизотермической плазме приводит также к коллективным ионным возбуждениям, в частности к генерации ионно-звуковых волн [33–36].

Сравнение кинетической модели (Власова–Пуассона), которая описывает поведение электронов и ионов с помощью кинетических уравнений для функций распределения, с гидродинамической моделью Захарова для одних и тех же значений параметров и одинаковых начальных условий было проведено в работе [37], где амплитуда длинноволнового поля (накачки) со временем не изменялась. Наиболее корректным было сравнение

для случая неизотермической плазмы. При формировании каверны, на начальной стадии нелинейного процесса в режиме постоянной накачки (который, в некоторой степени, подобен эволюции начального состояния) заметны отличия в формировании каверн плотности, форма которых в кинетической модели не соответствует структуре возмущений, характерных для модуляционной неустойчивости. Хотя в обоих случаях вытеснение ВЧ полем плазмы приводит к образованию областей с пониженной плотностью, величина изменений последней в модели Захарова оказалась значительно больше, чем в модели Власова–Пуассона. То есть, было показано, что кинетическое затухание поля на частицах способно исказить процесс модуляционной неустойчивости, возможно приводя к иным последствиям, в частности к появлению групп быстрых частиц и преждевременному разрушению каверн плотности.

Весьма интересно сравнение гидродинамической модели Захарова с моделью, в которой использовано кинетическое описание электронов и гидродинамическое для ионов [38]. Здесь также рассматривался случай постоянной накачки. Данная модель значительно лучше описывает формирование каверн, характерных для развитой модуляционной неустойчивости, которые на начальной стадии нелинейного процесса практически не отличаются от подобных образований в гидродинамической модели Захарова. Надо отметить, что модели, которые используют такое кинетическое описание электронного компонента плазмы, а ионы представлены гидродинамически, позволяют увидеть формирование каверн плотности плазмы и способны более точно определить характеристики распределения электронов по скоростям, в частности их температуру, хотя не дают представления о распределении ионов по энергиям.

При представлении ионов частицами в рамках так называемых гибридных моделей¹ (электроны описаны гидродинамически, а ионы – крупными частицами) флуктуации ионной плотности оказываются весьма значительными [39–41], что ускоряет процесс развития параметрической неустойчивости настолько, что линейная стадия роста возмущений практически выпадает из наблюдения (хотя это, как будет отмечено ниже, обусловлено, в том числе, и иными причинами). Рассмотрение в рамках таких гибридных моделей позволяет учесть инерцию ионов при формировании и эволюции каверн плотности плазмы, в частности, механизм их разрушения. Именно прямое моделирование коллапса методом частиц, по мнению, высказанному В.Е. Захаровым и его коллегами (см. [42]), является «наиболее последовательным». Действительно, кинетическое и гидродинамическое описания оперируют объектами, которые представляют собой не частицы, а малые фазовые объемы и в классическом пределе эти фазовые объемы сколь угодно малы. Это приводит к меньшей инерционности вещества, чем при его описании частицами, хорошо локализованными в обычном пространстве и в пространстве скоростей. Что касается частиц, то здесь другая крайность, крупные частицы обладают излишне большой инерционностью, потому их часто заменяют локальными объектами областями–ячейками, где происходит осреднение внутреннего содержимого. Это приближает такой подход на малых масштабах к гидродинамическому описанию, сохраняя на больших масштабах особенности метода крупных частиц и их осредненную инерционность. Можно увеличивать число модельных частиц в описании, уменьшая удельную долю (заряд и массу) каждой, хотя приблизиться к реальным физическим параметрам в трехмерном пространстве вряд ли удастся. Далее мы используем для одномерного моделирования $2 \div 5 \cdot 10^4$ модельных частиц-ионов (что в трехмерной модели соответствовало бы $10^{13} \div 10^{14}$ таких объектов в объеме рассмотрения), эти частицы уже по своим характеристикам отвечают отдельным ионам. Потому динамика моделирующих ионы частиц в этом случае в значительной степени адекватна динамике ионов плазмы, более того механизмы обмена энергией между полем и частицами отвечают реальному взаимодействию ионов со спектром НЧ колебаний.

Это означает что, в одномерных гибридных моделях с большим числом частиц можно обеспечить корректное описание нелинейного затухания Ландау медленных возмущений плотности плазмы на ионах, оставляя за рамками этого подхода проблемы описания деталей функции распределения электронов. Учет нерезонансного взаимодействия частиц–ионов с модами НЧ спектра, захват ионов в потенциальные ямы таких колебаний приводит к дополнительной неустойчивости каверн плотности, возникающих в результате модуляционной неустойчивости, а также к появлению групп быстрых частиц.

В работе [41], было проведено сравнение двух моделей – гидродинамической модели Захарова и гибридной при одинаковых значениях параметров и одинаковых начальных условиях. За счет большего уровня флуктуаций ионной плотности количество каверн в гибридной модели оказалось заметно больше, и они менее глубокие, чем в модели Захарова. Интегральные показатели обеих моделей практически одинаковы. Недостатком работы этих авторов является несамосогласованное описание, то есть отсутствие учета возбуждаемого спектра на волну накачки. Подчеркнем, что в случаях гидродинамического описания в модели Захарова [41] и описания в рамках кинетических уравнений для функции распределения электронов [43], каверны остаются стабильными.

Если плотность энергии поля заметно превосходит плотность тепловой энергии плазмы, развитие модуляционной неустойчивости по крайней мере на начальной стадии процесса происходит по сценариям, предложенным В.П. Силиным [10,21]. В моделях В.П. Силина мощная ленгмюровская волна в холодной плазме

¹ Это название было предложено авторами [41].

приводит к интенсивным осцилляциям скорости электронов, амплитуда которых сравнима с длиной волны мод возбуждаемого спектра. В этом случае, вообще говоря, неустойчивость следовало бы называть параметрической [10]. Тем не менее, обе модели Захарова и Силина оказываются физически подобны [44]. Именно из-за этого термин модуляционная неустойчивость применим для описания процесса неустойчивости мощного ленгмюровского поля в модели Силина.

В частности, даже в одномерном численном моделировании процесса на базе обобщенных в работах [45, 46] гидродинамических уравнений Силина, развивалась модуляционная неустойчивость и происходил частичный обмен энергией между ее коротковолновым спектром и интенсивной волной накачки. В гибридной модели Силина (электроны описаны гидродинамически, а ионы – крупными частицами) можно было наблюдать физический коллапс [40], обусловленный не только неравновесным начальным состоянием каверн (из-за нарушения баланса между ВЧ давлением и давлением плазмы) и эффектом выгорания поля, но и учетом инерции ионов. При этом ионная каверна «схлопывалась», то есть, переходила в режим пересечения траекторий частиц [39, 40]. Отметим, что динамика процесса, по крайней мере, на начальной стадии развитого режима совпадала с ранее выполненными численными расчетами [21]. Энергия, которую отбирали ионы, оказалась порядка $(m_e / m_i)^{1/3}$ начальной энергии волны накачки [40] (здесь m_e и m_i – массы электронов и ионов, соответственно). Для электронов переход в режим пересечения траекторий мог сдерживаться существованием ионной каверны, что способно было синхронизовать выброс быстрых электронов и ионов в момент её разрушения. Эксперименты по созданию вблизи плазменного резонанса в неоднородной плазме значительной плотности энергии поля W , превышающей плотность тепловой энергии плазмы $n_0 T_{e0}$, с частотой, близкой к ленгмюровской, демонстрировали на фоне нагрева электронов вблизи плазменного резонанса появление коротких импульсов быстрых частиц. Причем, наряду с электронами имел место вынос энергии из области плазменного резонанса ионами [47–49] с достаточно большими энергиями (см., например, обзорную работу [49]). Область источников электронных импульсов соответствовала малым размерам каверн плотности. Соотношение энергии, запасенной как в быстрых ионах после разрушения каверны, примерно отвечало приведенным в теории [40, 50–52] значениям.

Рассмотрение процессов параметрической неустойчивости ленгмюровских волн в условиях применимости уравнений Захарова и уравнений Силина обычно рассматривалось теоретиками отдельно, хотя эксперименты часто не разделяли эти процессы. Поэтому представляет интерес сравнить характер протекания модуляционной неустойчивости интенсивных ленгмюровских колебаний в горячей и холодной плазме в рамках гибридных самосогласованных моделей. Основное внимание было обращено на поведение ионного компонента плазмы. Оказалось, что доля энергии ВЧ поля, передаваемая ионам в случае горячей плазмы порядка $W / n_0 T_{e0}$, а в случае холодной плазмы были подтверждены оценки [40] порядка $(m_e / m_i)^{1/3}$, причем в последнем случае доля быстрых частиц в распределении их по энергиям оказалась выше [50–52].

Особое внимание в данной работе уделено сравнению характера возбуждения коллективных степеней свободы низкочастотных движений, в частности, генерация ионных волн в гибридных моделях Захарова и Силина. Важно было также выяснить, как влияет скорость выгорания ВЧ поля в кавернах на характер динамики ионов. Эти и другие вопросы обсуждаются ниже.

Целью данной работы является сравнение различных 1D моделей описания процесса модуляционной неустойчивости интенсивных длинноволновых ленгмюровских колебаний в горячей и холодной плазме.

МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЛЕНГМЮРОВСКОЙ ВОЛНЫ В ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЕ

Гидродинамическая модель Захарова. Описание поведения электронов плазмы в условиях, когда фазовые скорости ленгмюровских волн превосходят их тепловую скорость, может быть гидродинамическим. Ионы также можно описывать гидродинамически. По существу, такая система представляет собой двухжидкостную гидродинамику с электронной и ионной жидкостями.

Для упрощения описания, ниже ограничимся одномерным случаем. Для скорости v_e и плотности n_e электронов справедливы следующие уравнения

$$\frac{\partial v_e}{\partial t} + \frac{e}{m_e} E + \frac{1}{m_e n_e} \frac{\partial P_e}{\partial x} = -v_e \frac{\partial v_e}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + n_0 \frac{\partial v_e}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} (n_e \cdot v_e), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} E = 4\pi e \cdot (n_i - n_e), \quad (3)$$

где $E = -\partial\phi / \partial x$, ϕ – напряженность и потенциал электрического поля колебаний, $P_e = n_e T_e$ – давление, T_e – температура в энергетических единицах и $v_{Te} = \sqrt{T_e / m_e}$ – тепловая скорость электронов, n_i – плотность ионов

плазмы, n_0 – невозмущенная плотность как электронов, так и ионов плазмы, $\omega_{pe} = (4\pi e^2 n_0 / m_e)^{1/2}$ – ленгмюровская частота плазмы.

Система уравнений (1) – (3) трансформируется согласно процедуре, представленной в [53] (см. также [44]) в два уравнения для медленно меняющейся амплитуды ВЧ поля E и плотности ионов n_i :

$$i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{v_{Te}^2}{2\omega_{pe}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} E - \frac{\omega_{pe}}{2n_0} \cdot n_i E + i \cdot \theta \cdot E = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 n_i}{\partial t^2} - c_s^2 \frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} = \frac{1}{16\pi m_i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |E|^2, \quad (5)$$

где скорость звука $c_s = \sqrt{T_e / m_i}$, а амплитуду электрического поля представим в виде $E = \sum_n E_n \exp\{ik_n x\} = \sum_n E_n \exp\{ink_0 x\}$, где величина $k_n = nk_0$ определяет дискретный набор волновых чисел мод спектра. Эти уравнения известны как уравнения Захарова [11] в одномерном случае в условиях $W = |E_0|^2 / 4\pi \ll n_0 T_e$.

Кинетическая (Власова–Пуассона) модель. Рассмотрим кинетическую модель (Власова–Пуассона), которая описывает поведение электронов и ионов с помощью кинетических уравнений для функций распределения [37].

$$\frac{\partial f_e}{\partial \tau} + v_e \frac{\partial f_e}{\partial x} - [E(t) + E(x, t)] \frac{\partial f_e}{\partial v_e} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial \tau} + \sqrt{\mu\alpha} \cdot v_i \frac{\partial f_i}{\partial x} + \sqrt{\mu/\alpha} \cdot [E(t) + E(x, t)] \frac{\partial f_i}{\partial v_i} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial \tau} = n_i - n_e, \quad (8)$$

где возмущенная плотность частиц $n_\beta = \int_{-\infty}^{\infty} dv_\beta \cdot f_\beta(x, v_\beta, \tau)$, $\tau = \omega_{pe} t$, $\mu = m_e / m_i$, $\alpha = T_{i0} / T_{e0}$, координата нормирована на $\lambda_{de} = \sqrt{T_e / 4\pi e^2 n_0}$, скорости – на $v_{T\beta} = \sqrt{T_\beta / m_\beta}$. Данная модель может быть названа как кинетическая (Власова – Пуассона) модель [37].

Комбинированная модель Власова–Пуассона. Если описывать модуляционную неустойчивость с помощью кинетического уравнения для функции распределения электронов, а для ионов использовать гидродинамическое представление, то к уравнениям для возмущений плотности и скорости ионов

$$\frac{\partial n_i}{\partial \tau} - \frac{\partial(n_i v_i)}{\partial \tau} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial \tau} - v_i \frac{\partial(v_i)}{\partial \tau} = \mu[E(t) + E(x, t)] \quad (10)$$

следует добавить уравнения для функции распределения электронов и уравнение Пуассона (6) и (8) [37]. В двух последних случаях авторы [37, 38] амплитуду E_0 интенсивной ленгмюровской волны $E(t) = E_0 \cos \omega_0 t$ (здесь волны накачки) полагали постоянной [37] или медленно затухающей [38], вследствие столкновительных механизмов поглощения энергии в плазме. Учет влияния спектра $E(x, t)$ неустойчивости на волну накачки не проводился.

Гибридная модель Захарова. Если ионы описывать крупными частицами, уравнения движения для которых имеют вид

$$\frac{d^2 x_s}{dt^2} = \frac{e}{m_i} \sum_n \bar{E}_n \cdot \exp\{ik_0 n x_s\}, \quad (11)$$

то возмущения плотности ионов можно определить как

$$n_m = n_0 \cdot \frac{k_0}{2\pi} \int_{-\pi/k_0}^{\pi/k_0} \exp[-ink_0 \cdot x_s(x_0, t)] \cdot dx_{s0}, \quad (12)$$

а напряженность усредненного по быстрым осцилляциям поля в виде

$$\bar{E}_n = -ik_0 n \tilde{\phi}_n = -\frac{ik_0 m n T}{en_0} - \frac{ik_0 n e}{4m_e \omega_{pe}^2} (E_n E_0^* + E_0 E_{-n}^* + \sum_{m \neq 0, n} E_{n-m} E_{-m}^*), \quad (13)$$

Для поля накачки, которой является длинноволновая ленгмюровская волна большой амплитуды, получим

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} - i \frac{\omega_0}{2n_0} \cdot \sum_m n_{i,-m} E_m = 0. \tag{14}$$

В этом случае уравнения (4), (11) - (14) описывают так называемую гибридную модель, где электроны описаны гидродинамически, а ионы – крупными частицами [41] (см., также [44]).

Сравнение кинетических (Власова–Пуассона) моделей и гидродинамической модели Захарова [37]. Кинетическая модель (Власова–Пуассона), которая описывает поведение электронов и ионов с помощью кинетических уравнений для функций распределения (6)-(8) рассматривалась для области $L \approx 105\lambda_{de}$, отношение начальной плотности энергии к тепловой энергии плазмы $W/n_0T_e \approx 3,125 \cdot 10^{-2}$, отношение масс электрона и иона $\mu = m_e/m_i = 1/1836$, количество позиций в реальном и фазовом пространстве – по 256. Гидродинамическая модель Захарова (4)-(5) применялась для тех же условий. Амплитуда длинноволнового поля (накачки) E_0 со временем не изменялась. Для наиболее корректного сравнения двух моделей был выбран случай неизотермической плазмы $\alpha = T_i/T_e = 0,1$. Ниже, на рис.1 показан профиль плотности энергии коротковолнового поля $|E(x,t)|^2$ (рис.1a) и плотности плазмы n_m (рис.1b).

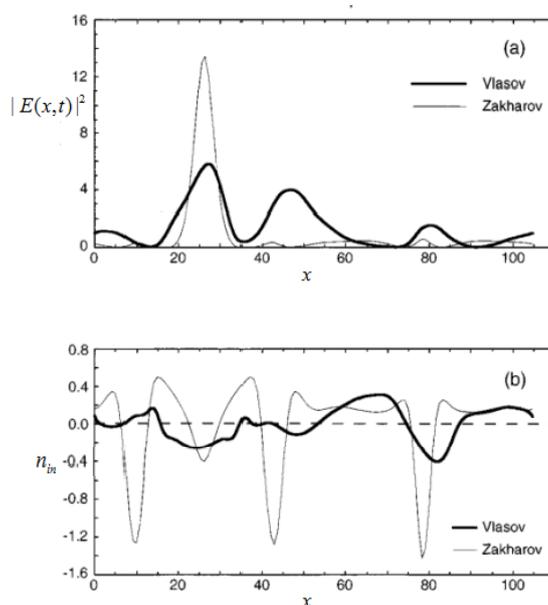


Рис.1. Профиль плотности энергии коротковолнового поля в пространстве $|E(x,t)|^2$ (a) и возмущений плотности плазмы n_m (b) в момент времени $t = 1600\omega_{pe}^{-1}$ для двух моделей [37].

Можно видеть, что учет кинетического затухания на частицах в модели Власова–Пуассона приводит к деформации каверны, максимальные значения плотности энергии коротковолнового поля и возмущения плотности плазмы при этом заметно меньше, чем в модели Захарова. Формирование каверны на начальной стадии нелинейного процесса в режиме постоянной накачки (который лишь в некоторой степени подобен эволюции начального состояния) обнаруживает отличия в формировании каверн плотности, форма которых в кинетической модели не соответствует структуре возмущений, характерных для модуляционной неустойчивости. Хотя в обоих случаях вытеснение ВЧ полем плазмы происходит в областях с пониженной плотностью. Это свидетельствует от том, что выбор начальных условий способен повлиять на развитие неустойчивости, которая может принимать характер несколько отличающийся от модуляционной. Причиной такого отличия в степени влияния кинетического поглощения энергии поля частицами, возникновение при этом групп быстрых частиц, что способно нарушить топологию каверн.

Если модифицировать модель Власова–Пуассона, сохранив представление электронов с помощью кинетического уравнения для функции распределения (6), а для ионов воспользоваться уравнениями квазигидродинамики (9), (10) и уравнением Пуассона (8), то поведение этой модели и гидродинамической модели Захарова в значительной степени становится подобным. Каверны плотности и характер распределения плотности коротковолнового спектра практически не отличаются, однако модифицированная модель Власова–Пуассона способна определить характеристики распределения электронов по скоростям, в частности их температуру, хотя не дает представления о распределении ионов по энергиям.

Отметим, что описания динамики процесса развития коротковолнового спектра и формирования каверн плотности в рамках моделей Власова–Пуассона и гидродинамической модели Захарова авторы [37,38] были не самосогласованными, то есть обратное влияние возбуждаемого спектра на волну накачки не было учтено. Тем не менее, подобные сравнения позволили обнаружить сильные и слабые стороны подходов, выявить

особенности развития процессов в условиях различных моделей.

Сравнение гидродинамической и гибридной моделей Захарова. Обсудим две модели: традиционную гидродинамическую модель Захарова (4)-(5) и гибридную модель Захарова (4), (11)-(13). Уравнение для накачки (14) авторы заменили простой динамикой слабого затухания накачки. Для этого авторы [41] положили все параметры одинаковыми, отношение масс $\mu = 1/(16 \cdot 1836)$, плазма изотермическая, область рассмотрения $L = 1,8 \cdot 10^3 \lambda_{de}$, для гидродинамического описания использовано 600 мод спектра, для гибридного – 3000 позиций, то есть координатная область разбита именно на такое количество участков. Так же, как и в предыдущих работах [37-38], авторы [41] рассмотрели не самосогласованный случай постоянного или слабо меняющегося поля интенсивной ленгмюровской волны, влиянием на которую спектра возбуждаемых коротковолновых возмущений пренебрегалось. Однако, как и в предыдущем случае важным итогом такого сравнения является выявление отличий в динамике процесса, описываемого разными моделями.

Прежде всего, авторы [41] отметили значительно более быстрый рост возмущений в гибридной модели, который они пояснили большими значениями возмущений ионной плотности в выбранной ими координатной сетке. Интегральные показатели – энергия ВЧ коротковолнового спектра на начальной стадии модуляционной неустойчивости оказались подобны (рис.2).

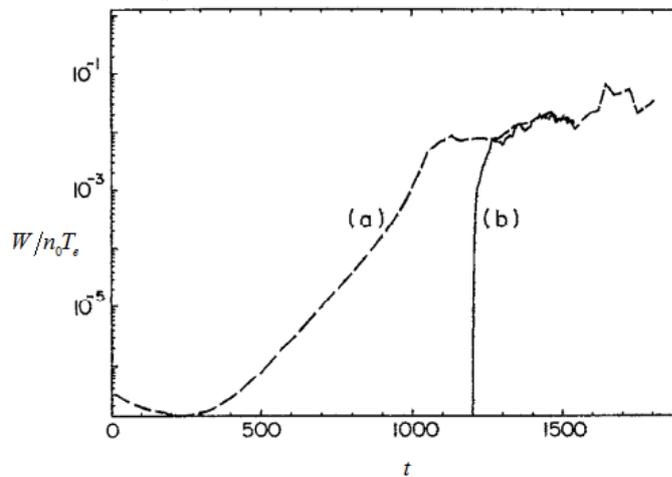


Рис.2. Отношение плотности энергии поля к плотности тепловой энергии электронов для случаев гидродинамической (а) и гибридной (б) моделей Захарова [41] (по оси ординат) от времени t .

На начальной стадии развитого режима процесса было обнаружено, что выполняется соотношение между относительными возмущениями плотности ионов $\delta n_{in} / n_0$ и плотностью энергии коротковолнового поля $|E|^2 = \sum_n |E_n|^2$ (рис. 3,4).

$$\delta n_{in} / n_0 \propto |E|^2 / 8. \quad (15)$$

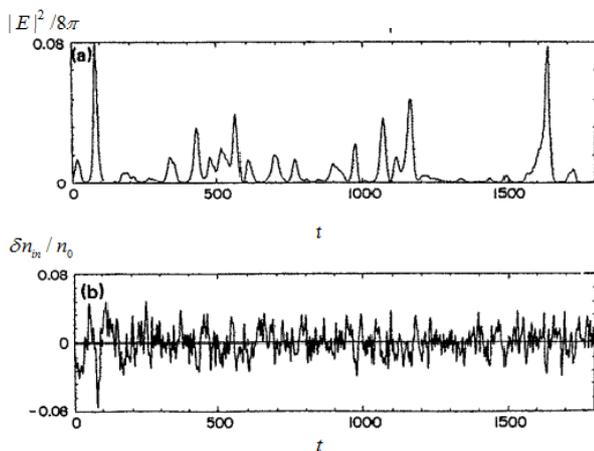


Рис.3. Огибающая ВЧ поля $|E|^2 / 8\pi$ (а) и относительные отклонения плотности ионов $\delta n_{in} / n_0$ (б) в гибридной модели (4), (11)-(13) в момент времени $340 \omega_{pe}^{-1}$ [41].

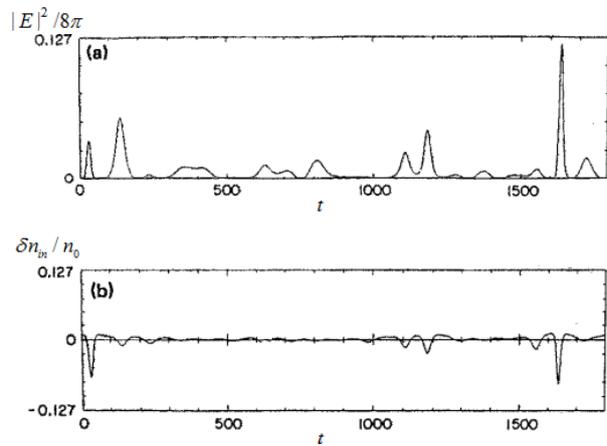


Рис.4. Огибающая ВЧ поля $|E|^2 / 8\pi$ (а) и относительные отклонения плотности ионов $\delta n_{in} / n_0$ (б) в гидродинамической модели (4)-(5) в момент времени $1363 \omega_{pe}^{-1}$ [41].

Здесь для удобства сравнения выбраны подобные режимы неустойчивости, которые характеризуются примерно равными максимальными амплитудами поля и возмущений плотности. Прежде всего, следует отметить заметно большее число каверн плотности плазмы, значительные флуктуации плотности ионов. Соответственно, количество солитонобразных возмущений плотности коротковолнового поля также больше в гибридной модели. Максимальная глубина каверн в гибридной модели всегда меньше, характерные размеры вдоль системы подобны. Оценки нагрева ионов в условиях постоянной величины или медленного изменения поля накачки вряд ли представляют интерес, ибо влияние коротковолнового спектра на накачку авторы не учитывали.

МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЛЕНГМИЮРОВСКОЙ ВОЛНЫ В ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЕ

В случае большой интенсивности внешнего длинноволнового поля для холодной плазмы $W/n_0 T_e t$, следует воспользоваться подходом, изложенным в работах В.П. Силина [10]. Частицы находятся в поле внешней ленгмюровской волны большой амплитуды (длину которой для упрощений расчетов так же как в моделях Захарова, положим равной бесконечности), осциллируя со скоростью $u_{0\alpha} = -(e_\alpha |E_0| / m_\alpha \cdot \omega_0) \cdot \cos \phi = -\omega_0 b_0 \cdot \cos \phi$, где $b_0 = eE_0 / m_e \omega_0^2$ – амплитуда колебаний электронов в поле внешней ленгмюровской волны. Компоненты напряженности поля внешней ленгмюровской волны определяются следующим образом

$$E_0 = -i(|E_0| \exp\{i\omega_0 t + i\phi\} - |E_0| \exp\{-i\omega_0 t - i\phi\}) / 2, \quad (16)$$

здесь $\omega_0 \approx \omega_{pe} = \sqrt{4\pi e^2 n_0 / m_e}$ – ее частота, e, m_e – заряд, масса электронов, $|E_0|, \phi$ – медленно меняющиеся амплитуда и фаза, n_0 и T_e – плотность и температура электронов плазмы. Из уравнений (1)–(3), исключая электрическое поле можно получить

$$\frac{\partial v_{\alpha n}}{\partial t} + \theta_{\alpha n} \cdot ik_0 n \cdot e_\alpha n_{\alpha 0} = -ik_0 \cdot n \cdot \sum_m v_{\alpha n-m} \cdot \theta_{\alpha m}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \theta_{\alpha n}}{\partial t} + \frac{4\pi e_\alpha i}{k_0 n \cdot m_\alpha} \sum_\beta v_{\beta n} \cdot \exp\{i(a_{\beta n} - a_{\alpha n}) \cdot \sin \Phi\} = -ik_0 \cdot \sum_m m \theta_{\alpha n-m} \cdot \theta_{\alpha m}. \quad (18)$$

где $v_{\alpha n} = e_\alpha \cdot n_{\alpha n} \cdot \exp\{-ia_{\alpha n} \cdot \sin \Phi\}$, $\theta_{\alpha n} = v_{\alpha n} \cdot \exp\{-ia_{\alpha n} \cdot \sin \Phi\}$, $a_{\alpha n} = ne_\alpha k_0 E_0 / m_\alpha \cdot \omega_0^2$, $\Phi = \omega_0 t + \phi$.

Далее, используя процедуры, которые подробно изложены, например, в [44], получим уравнения, описывающие нелинейную динамику процесса параметрической неустойчивости ленгмюровской волны большой амплитуды в холодной плазме.

Гидродинамическая модель Силина. Уравнение, описывающее электроны плазмы (электроны представлены как электронная жидкость) может быть записано как

$$\frac{\partial E_n}{\partial t} - i \frac{\omega_{pe}^2 - \omega_0^2}{2\omega_0} E_n + \theta \cdot \frac{n^6}{n_M^6} \cdot E_n - \frac{4\pi\omega_{pe} v_{in}}{k_0 n} J_1(a_n) \cdot \exp(i\phi) - i \frac{\omega_0}{2en_0} \sum_m v_{in-m} [E_{-m}^* J_2(a_{n-m}) e^{2i\phi} + E_m \cdot J_0(a_{n-m})] = 0, \quad (19)$$

где слагаемое $\theta \cdot \frac{n^6}{n_M^6} \cdot E_n$ в уравнении (19) моделирует затухание ВЧ мод спектра на электронах, причем

$n_M = 20$, $E_n = |E_n| \cdot \exp\{i\psi_n\}$ – медленно меняющаяся комплексная амплитуда напряженности электрического поля плазменных электронных колебаний, волновое число которых равно $k_n = nk_0$, k_0 – выбранный достаточно малый масштаб в пространстве волновых чисел, $a_n = a \cdot n$, n, m – целые числа, не равные нулю и ± 1 , то есть $n(ek_0 E_0 / m_e \cdot \omega_0^2) = nk_0 b = a_n$.

Для ионов в гидродинамической модели справедливо выражение

$$\frac{\partial^2 v_{in}}{\partial t^2} = -\Omega_i^2 \{v_{in} [1 - J_0^2(a_n)] + \frac{2}{3} J_2^2(a_n)\} + \frac{ik_0 n}{8\pi} J_1(a_n) [E_n \cdot e^{-i\phi} - E_{-n}^* \cdot e^{i\phi}] - \frac{n^2 k_0^2}{64\pi^2 en_0} \sum_m J_0(a_n) \cdot E_{n-m} \cdot E_{-m}^* + \frac{nk_0^2}{64\pi^2 en_0} J_2(a_n) \cdot \sum_m (n-m) [E_{n-m} \cdot E_m \cdot e^{-2i\phi} + E_{m-n}^* \cdot E_{-m}^* e^{2i\phi}], \quad (20)$$

где $n_m = v_{in} / e$.

Уравнение, самосогласованно учитывающее обратное действие коротковолнового спектра на волну накачки, принимает вид

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} - i\Delta E_0 = -\frac{\omega_0}{2en_0} \sum_m v_{i,-m} [E_m^{(-)} \cdot J_2(a_m) \exp[2i\phi] + E_m^{(+)} \cdot J_0(a_m)], \quad (21)$$

как показано в [44], при $a_n \ll 1$ уравнения гидродинамической модели Силина (19) – (21) с учетом представления $J_1(a_n) \approx a_n / 2$, $J_0(a_n) \approx 1$, $J_2(a_n) \approx a_n^2 / 8$ совпадают с гидродинамической моделью Захарова в

сверхзвуковом пределе в условиях $W = |E_0|^2 / 4\pi \ll n_0 T_e$, с точностью до величины расстройки $(\omega_{pe}^2 - \omega_0^2) / 2\omega_0 \rightarrow (\omega_{pe}^2 - \omega_0^2 + k_0^2 n^2 v_{Te}^2) / 2\omega_0$. Связь между возмущениями плотности (поведение которых представлено на рис. 5) и электрического поля определяется соотношением $E_n = 4\pi i e N_n / 2k_0 n$.

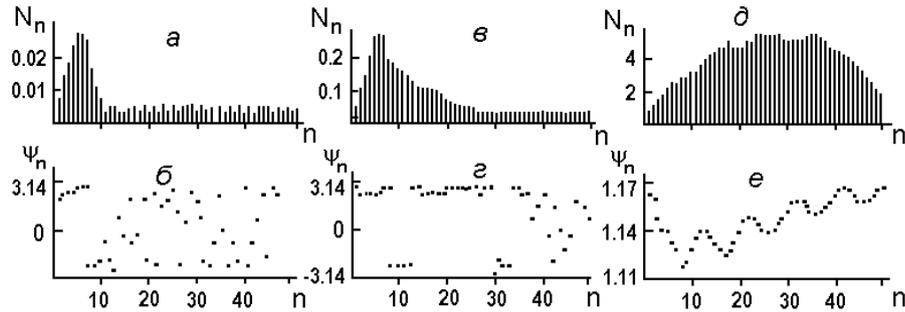


Рис.5. Процесс формирования волнового пакета ленгмюровских волн при неустойчивости.

Видны синхронизация фаз (верхние рисунки) и уширение спектра $N_n = N_n \exp(i\Psi_n)$ (нижние рисунки) для моментов времени $\tau = 4$ (а, б); $\tau = 7$ (в, з); $\tau = 8$ (д, е) [46].

Важно отметить, что в отличие от случая $W / n_0 T_e < 1$, быстрое расширение спектра возмущений в коротковолновую область обусловлено в значительной степени неустойчивостью волны накачки, что следует из рассмотрения линейного инкремента.

Действительно, расстройка $\Delta = (\omega_{pe}^2 - \omega_0^2) / 2\delta\omega_{pe}$ достигает величины $(m_e / 2M)^{1/3} J_1^{2/3}(a_{n_m})$, в случае максимального инкремента линейной неустойчивости, нормированного на частоту ленгмюровской волны [10]

$$\delta / \omega_{pe} = \frac{i}{\sqrt[3]{2}} \left(\frac{m_e}{m_i} \right)^{1/3} J_1^{2/3}(a_n). \quad (22)$$

С уменьшением амплитуды волны накачки максимум инкремента смещается в сторону больших волновых чисел, не меняя своего значения. Кроме этого, волна накачки способствует синхронизации фаз растущих мод спектра, формируя тем самым пространственную структуру каверны (ямки плотностей электронов и ионов плазмы, формы которых, вообще говоря, не совпадают) и ВЧ наполнения. Решая систему уравнений (19)–(21), можно убедиться [46] в том, что энергия, заключенная в коротковолновом быстро уширяющемся в пространстве волновых чисел спектре ленгмюровских волн, возбуждаемых волной накачки, растет. Неустойчивость приводит к сужению линейных размеров каверны в конфигурационном пространстве, формированию достаточно резких перепадов плотности, «прокидывание» которых должно, вообще говоря, приводить к интенсивной передаче энергии спектра электронам плазмы. Однако, в рамках данной модели этот процесс описать не представляется возможным. Поведение ионной плотности также демонстрирует склонность к переходу к режиму с обострением.

Гибридная модель Силина. Уравнение для электронов (19) остается справедливым в данной модели. При описании ионов крупными частицами, уравнение движения можно представить в следующем виде

$$\frac{d^2 x_s}{dt^2} = \frac{e}{m_i} \sum_n \bar{E}_n \cdot \exp\{ik_0 n x_s\}, \quad (23)$$

а плотность ионов определим как

$$n_{in} = v_{in} / e = n_0 \cdot \frac{k_0}{2\pi} \int_{-\pi/k_0}^{\pi/k_0} \exp[-ink_0 \cdot x_s(x_0, t)] \cdot dx_{s0}. \quad (24)$$

Напряженность медленно меняющегося электрического поля \bar{E}_n , действующего на ионы, равна

$$\begin{aligned} \bar{E}_n = & \left(-\frac{4\pi i}{k_0 n} \right) v_{in} \left[1 - J_0^2(a_n) + \frac{2}{3} J_2^2(a_n) \right] + \frac{1}{2} J_1(a_n) [E_n \cdot e^{-i\phi} - E_{-n}^* \cdot e^{i\phi}] - \\ & - \frac{ink_0}{16\pi e n_0} J_0(a_n) \sum_m E_{n-m} \cdot E_{-m}^* - \frac{ik_0 J_2(a_n)}{16\pi e n_0} \sum_m (n-m) [E_{n-m} \cdot E_m \cdot e^{-2i\phi} + E_{m-n}^* \cdot E_{-m}^* \cdot e^{2i\phi}], \end{aligned} \quad (25)$$

Для $E_0 = |E_0| \cdot \exp\{i\phi\}$ также можно записать уравнение

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} = -\frac{\omega_0}{2en_0} \sum_m v_{i,-m} [E_{-m}^* \cdot J_2(a_m) e^{2i\phi} + E_m \cdot J_0(a_m)]. \quad (26)$$

Отметим, что величины, отвечающие разному знаку нижнего индекса при этом независимы. При выводе уравнений (22)–(26) [44], использовано разложение

$$\exp\{ia \cdot \sin \Phi\} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(a) \cdot \exp\{im\Phi\}, \quad (27)$$

где $J_m(x)$ – функция Бесселя, причем $J_0(x) = J_0(-x)$, $J_1(x) = -J_1(-x) = J_{-1}(-x)$, $J_2(x) = J_{-2}(x) = J_2(-x)$.

При малых уровнях поглощения и малых начальных флуктуациях поведение волны накачки представлено на рис 6. Видно, что волна накачки и коротковолновый спектр в развитом режиме обмениваются энергией.

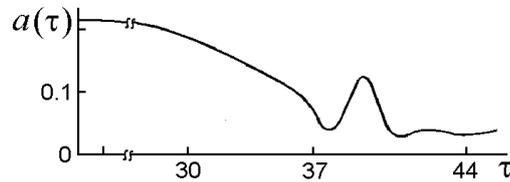


Рис.6. Амплитуда поля накачки $a(\tau)$ как функция времени τ в гибридной модели в случае слабого поглощения энергии коротковолновых колебаний [40].

Большая часть энергии поля накачки в результате неустойчивости переходит в энергию коротковолнового ленгмюровского спектра, затем можно наблюдать частичный обмен энергией между спектром и волной накачки и при $\tau > 40$ ионная каверна «схлопывается», то есть, переходит в режим пересечения траекторий частиц. Развитие неустойчивости в гибридных моделях (22)-(26) было рассмотрено в работах [39–40]. Основное внимание было уделено режимам сильного поглощения энергии коротковолнового спектра за счет затухания Ландау, которое было введено феноменологически. Темп затухания ВЧ мод определял скорость выгорания поля в кавернах плотности, откуда ВЧ поле вытесняло частицы. Основная энергия неустойчивости сначала была сосредоточена в ВЧ поле коротковолнового ленгмюровского спектра, при этом формировался НЧ спектр возмущений. Затем энергия ВЧ спектра в значительной степени передавалась электронам. Сформированные каверны плотности при этом «схлопывались», траектории ионов пересекались, возмущения ионной плотности сглаживались, их масштаб увеличивался. Связь между ионными возмущениями и ВЧ полем ослаблялась и неустойчивость насыщалась. Амплитуда основной волны, испытав несколько небольших осцилляций, стабилизировалась на достаточно низком уровне. Основная энергия теперь содержалась в возмущениях электронного компонента плазмы. Некоторая небольшая часть начальной энергии переходила в кинетическую энергию ионов. Оценка плотности энергии передаваемой ионам E_{kin} определялась выражением [40, 50, 51]

$$\frac{E_{kin}}{W_0} \approx 0,27 \cdot I \cdot \left(\frac{m_i}{m_e}\right) \cdot \delta^2 / \omega_{pe}^2, \quad (28)$$

где W_0 – начальная плотность энергии интенсивной ленгмюровской волны, $I = \sum_s (d\xi_s/d\tau)^2$ – энергия ионов в соответствующей нормировке, δ – инкремент линейной неустойчивости.

Сравнение гидродинамической и гибридной моделей Силина. Поведение спектра убеждает в том, что в области взаимодействия формируется каверна плотности, причем ее размеры быстро уменьшаются [46]. В дальнейшем при слабых уровнях поглощения энергии в системе неустойчивость переходит в режим частичного обмена энергией между возбужденным спектром модуляционной неустойчивости и волной накачки. Однако дальнейшее уменьшение размеров каверны, то есть возникающий в отсутствии электронного давления в холодной плазме коллапс приводит в гидродинамической модели к срыву счета. С другой стороны, инерция ионов, которая в гибридной модели учитывается естественным образом, позволяет избежать срыва счета, который наблюдается в гидродинамической модели при критическом уменьшении размеров каверны. Ионы, переходя в режим пересечения траекторий, разрушают каверну и неустойчивость насыщается. При этом можно выяснить характер распределения ионов по скоростям. Энергия, которую отбирают ионы, оказывается порядка $(m_e/m_i)^{1/3}$ начальной энергии волны накачки [40]. Запасенная в коротковолновом ленгмюровском спектре энергия, скорее всего также должна быть в значительной степени передана электронам плазмы, причем для электронов переход в режим пересечения траекторий (в этом случае гидродинамические уравнения не применимы для описания электронов) может сдерживаться существованием ионной каверны, что способно синхронизировать выброс быстрых электронов и ионов в момент её разрушения.

СРАВНЕНИЕ ГИБРИДНЫХ МОДЕЛЕЙ ЗАХАРОВА И СИЛИНА

Ниже обсудим эффективность передачи энергии ионам и ионным возмущениям в результате развития модуляционных неустойчивостей в случаях неизотермической горячей и холодной плазмы в рамках гибридных моделей. Для каждой модели рассмотрены также два случая легких и тяжелых ионов. Представляет интерес выяснить как влияет затухание ВЧ спектра и соответственно выгорание поля в кавернах плотности на характер передачи энергии ионам плазмы. Ниже приведены последние результаты авторов, полученные совместно с Приймаком А.В.

Количество крупных частиц, моделирующих ионы, было выбрано $0 < s \leq S = 20000$. Крупные частицы, равномерно распределены на интервале $-1/2 < \xi < 1/2$, $\xi = k_0 x / 2\pi$, начальные условия для частиц $d\xi_s / d\tau|_{\tau=0} = v_s|_{\tau=0} = 0$, число мод спектра $-N < n < N$, $N = S/100$. Начальная нормированная амплитуда интенсивных колебаний $a_0(0) = ek_0 E_0(0) / m_e \omega_{pe}^2 = 0,06$, Начальные амплитуды ВЧ мод задаются выражением $e_n|_{\tau=0} = e_{n0} = (2 + g) \cdot 10^{-3}$ в модели Силина и несколько меньшими только лишь для более четкого выделения начальной стадии процесса $e_n|_{\tau=0} = e_{n0} = (0,5 + g) \cdot 10^{-4}$ в модели Захарова, где $g \in [0;1]$ – случайное число, $ek_0 E_n / m_e \omega_{pe}^2 = e_n \cdot \exp(i\psi_n)$, $\psi_n|_{\tau=0}$ также случайным образом распределялись в интервале $0 \div 2\pi$. Для возмущений плотности ионов n_{ni} и медленно меняющегося электрического поля \bar{E}_n использованы также безразмерные представления $M_n = M_{nr} + iM_{ni} = n_{ni} \omega_{pe} / n_0 \delta = \frac{\omega_{pe}}{\delta} \int_{-\pi/k_0}^{\pi/k_0} \exp(2\pi n \cdot \xi_s) \cdot d\xi_s$ и $ek_0 \bar{E}_n / m_e \omega_{pe}^2 = E_{nr} + iE_{ni}$. Параметры легких и тяжелых ионов в гибридных моделях Силина и Захарова представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры легких и тяжелых ионов в гибридных моделях Силина и Захарова

Модели /ионы	Легкие ионы	Тяжелые ионы
	$\frac{m_i}{m_e} = 2 \cdot 10^3$	$\frac{m_e}{m_i} = 8 \cdot 10^{-6}$
Гибридная модель Силина	$\frac{m_e \omega_{pe}^2}{m_i \delta^2} = 0,43$	$\frac{m_e \omega_{pe}^2}{m_i \delta^2} = 0,1$
	$\frac{\delta}{\omega_0} = 0,44 \left(\frac{m_e}{m_i}\right)^{1/3} = 0,034$	$\frac{\delta}{\omega_0} = 0,44 \left(\frac{m_e}{m_i}\right)^{1/3} = 0,0088$
	$\frac{\omega_0}{\delta} \approx \frac{\omega_{pe}}{\delta} = 29,4$	$\frac{\omega_0}{\delta} \approx \frac{\omega_{pe}}{\delta} = 113,6$
Гибридная модель Захарова	$\frac{m_e \omega_{pe}^2}{m_i \delta^2} = 2 \frac{n_0 T_e}{W} = 2 \cdot 10$	$\frac{m_e \omega_{pe}^2}{m_i \delta^2} = 2 \frac{n_0 T_e}{W} = 2 \cdot 10$
	$\frac{\omega_0}{\delta} = 2 \left(\frac{n_0 T_e}{W}\right)^{1/2} \left(\frac{m_i}{m_e}\right)^{1/2} = 282,6$	$\frac{\omega_0}{\delta} = 2 \left(\frac{n_0 T_e}{W}\right)^{1/2} \left(\frac{m_i}{m_e}\right)^{1/2} = 2234,4$
	$\frac{\delta}{\omega_0} = \frac{\delta}{\omega_{pe}} = 3,5 \cdot 10^{-3}$	$\frac{\delta}{\omega_0} = \frac{\delta}{\omega_{pe}} = 4,5 \cdot 10^{-4}$

Для параметров, определяющих характер поглощения энергии ВЧ спектра $n_M = 20$ и $\Theta = \theta / \delta = 0,05$ энергия основной волны, энергия мелкомасштабного ленгмюровского спектра, энергия переданная электронам и ионам плазмы, нормированные на начальную энергию основной волны, представлены на рис.7.

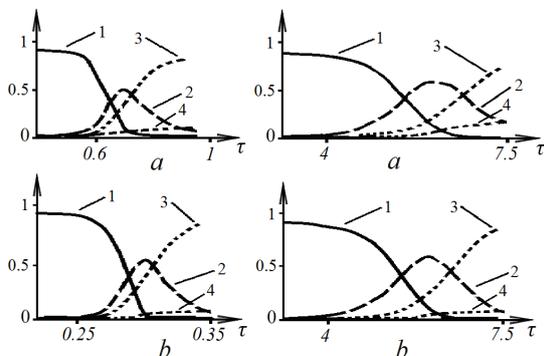


Рис.7. Относительные значения энергии основной волны (1), энергии мелкомасштабного ленгмюровского спектра (2), энергии переданной электронам (3) и ионам (4) плазмы для модели Захарова (слева) и модели Силина (справа) для легких ионов (a) и тяжелых ионов (b).

Анализ результатов численного моделирования показывает, что энергия интенсивной длинноволновой ленгмюровской волны переходит сначала в энергию ВЧ ленгмюровского коротковолнового спектра. Именно на этой стадии формируются каверны плотности плазмы, заполненные ВЧ полем. Затем ВЧ поле вследствие затухания на электронах, учтенного в данных моделях феноменологически, выгорает. При этом передавая свою энергию электронам плазмы. Каверны в этих условиях «схлопываются», возбуждаются НЧ волны, траектории

ионов пересекаются и энергия «схлопнувшихся» каверн и НЧ спектра передается ионам.

Можно определить в конце численного моделирования среднеквадратическую скорость $\sigma(v) = \sqrt{\sum_s v_s^2 / S}$, при этом в модели Захарова для легких ионов получим $\sigma(v) = 0,015$, для тяжелых $\sigma(v) = 0,006$, в модели Силина для легких ионов $\sigma(v) = 0,002$, а для тяжелых $\sigma(v) = 0,0005$. Полная энергия частиц в выбранной нормировке $I = \sum_s (d\xi_s / d\tau)^2$ в модели Захарова для легких ионов равна 4,689, для тяжелых 0,808, в модели Силина для легких ионов 0,086, а для тяжелых 0,005. Различия в величинах полной энергии в разных моделях определяются разными значениями линейного инкремента, а для случаев легких и тяжелых ионов, выбором массы иона. Можно построить на основе значений среднеквадратичной скорости нормальное распределение, тогда частицы, которые находятся вне его (в основном в так называемых «хвостах функции распределения») в модели Захарова для легких ионов обладают 13,8% полной энергии, для тяжелых 9,2%, а в модели Силина заметно больше, то есть для легких ионов 25,6%, а для тяжелых 13%, соответственно. То есть, в случае неустойчивости интенсивной волны в холодной плазме можно ожидать существенно большей доли быстрых частиц.

Нас будет интересовать не только распределение ионов по энергиям, но и возбуждение коллективных ионных колебаний (рис.8) для чего определим частоту моды с волновым вектором nk_0 этих колебаний

$$\frac{d\Phi_n}{d\tau} = -\frac{d}{d\tau} \frac{M_{nr}}{\sqrt{M_{nr}^2 + M_{ni}^2}} \bigg/ \frac{M_{ni}}{\sqrt{M_{nr}^2 + M_{ni}^2}}, \quad (29)$$

где фазы Φ_n НЧ мод спектра можно найти из выражения $M_n = M_{nr} + iM_{ni} = \sqrt{M_{nr}^2 + M_{ni}^2} \cdot \exp\{i\Phi_n\}$.

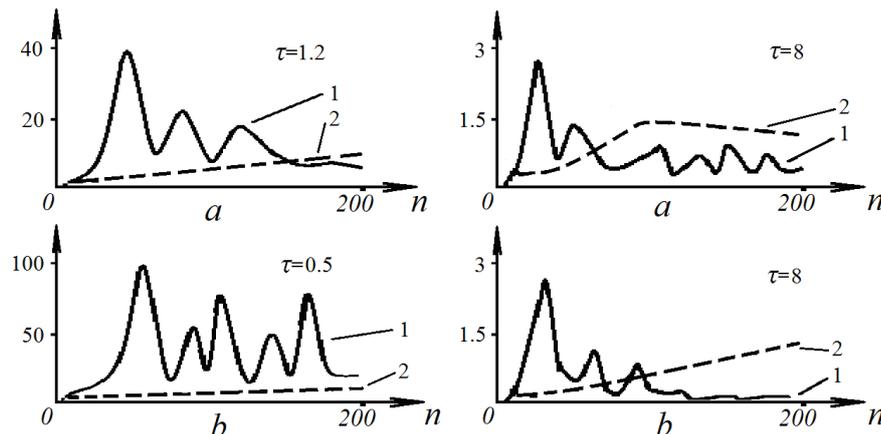


Рис.8. Амплитуда мод НЧ спектра и зависимость частоты от волнового числа мод для модели Захарова (слева) и модели Силина (справа) для легких ионов (a) и тяжелых ионов (b) 1 – спектр M_n , 2 – сглаженная средняя $\partial\Phi_n / \partial\tau$ на развитой стадии неустойчивости.

Следует обратить внимание тот факт, что интенсивность НЧ спектра в случае неизотермической плазмы (модель Захарова) достаточно велика в широком интервале волновых чисел, что соответствует спектру ионного звука после разрушения каверн плотности, обнаруженному в численных экспериментах [35]. Напротив, в холодной плазме в спектре доминируют длинноволновые колебания.

Для обеих моделей кинетическая энергия ионов в выбранной выше нормировке

$$\frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} d\xi_{s0} \left(\frac{d\xi_s}{d\tau} \right)^2, \quad (30)$$

а энергии коллективных возбуждений для моделей Захарова и Силина имеют вид, соответственно

$$\frac{1}{8\pi^2} \frac{m_e}{m_i} \sum_n \frac{1}{n^2} [1 - J_0^2(a_n) + \frac{2}{3} J_2^2(a_n)] |M_n|^2, \quad (31)$$

$$\frac{1}{8\pi^2} \left(\frac{m_e}{m_i} \right) \frac{1}{n_M^2} \frac{\delta}{\omega_{pe}} \sum_n |M_n|^2, \quad (32)$$

причем в модели Захарова эти колебания носят названия ионно-звуковых. На рис. 9. показана динамика изменения энергии ионов и энергии НЧ поля от времени.

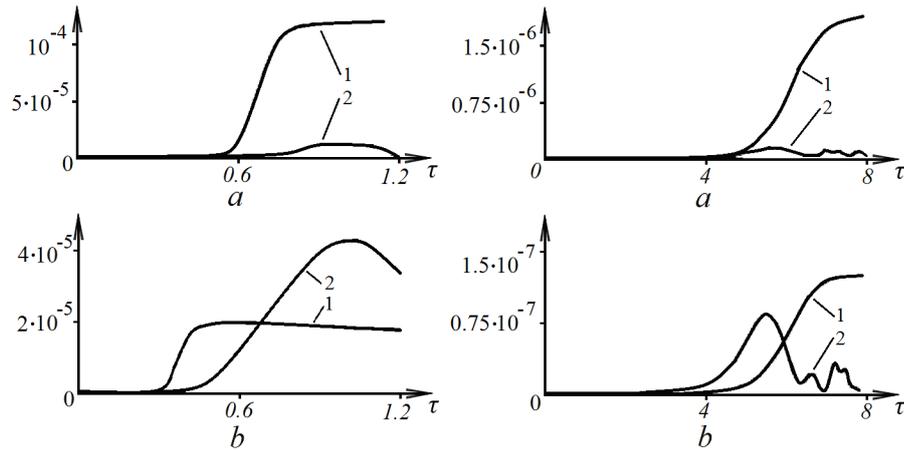


Рис.9 . Энергия ионов и НЧ поля для модели Захарова (слева) и модели Силина (справа) для легких ионов (а) и тяжелых ионов (б) 1 – кинетическая энергия, 2 – энергия поля колебаний, умноженная на 70.

Стоит обратить внимание на тот факт, что энергия НЧ поля значительно меньше энергии ионов во всех рассмотренных случаях. Уменьшение энергии поля со временем происходит из-за передачи энергии ионам а также из-за разрушения каверн плотности плазмы, на что было указано в работе [35].

Выбранный темп выгорания ВЧ поля в кавернах определяется величиной $\Theta = \theta / \delta = 0,05$. Представляет интерес выяснить, как зависят результаты расчетов от этого параметра. Очевидно, уменьшение этого параметра не только замедляет выгорание ВЧ поля в кавернах, но и уширяет спектр ВЧ мод, то есть увеличивает долю мелкомасштабных его компонент, что приводит к углублению каверн плотности плазмы и к увеличению кинетической энергии выгалаживаемых из каверн ионов. Отметим, что с уменьшением затухания ВЧ мод функция распределения ионов по скоростям в двух моделях по форме все ближе приближается к нормальному распределению, то есть к функции Максвелла.

В таблице 2 показана степень отличия распределения по скоростям, полученного численным моделированием от наиболее близкого по форме нормального распределения по скоростям, отвечающие рис. 10.

Таблица 2.

Отличия расчетного распределения скоростей от нормального распределения.

Модель / уровень поглощения	Отличие распределения по скоростям модели Захарова от нормального распределения	Отличие распределения по скоростям модели Силина от нормального распределения
$\Theta = 0,05$	19,9 %	13 %
$\Theta = 0,015$	9,9 %	13,4 %
$\Theta = 0,001$	6,9 %	8,8 %

Максимальное значение энергии ионно-звуковых колебаний при уменьшении поглощения ВЧ поля для неизотермической плазмы практически не изменяется, но формирование НЧ спектра ускоряется. В холодной плазме напротив заметно растет интенсивность длинноволновых НЧ колебаний при уменьшении поглощения ВЧ мод. В дальнейшем НЧ спектр подавляется, передавая свою энергию ионам.

Как и следовало ожидать с уменьшением поглощения ВЧ спектра энергия, в конечном итоге передаваемая ионам, растет практически в той же пропорции в неизотермической и в холодной плазме.

Отметим в заключении, что масштабы возмущений ионной плотности меньше дебаевского радиуса ионов $r_{Di} = v_{Ti} / \omega_{pi}$ не дают вклада в формирование низкочастотных электрических полей из-за эффекта экранировки. В терминах $r_{Di} k_0 / 2\pi$ – ионный дебаевский радиус можно оценить [54]

$$r_{Di} k_0 / 2\pi = R_{Di} \ll \left\langle \frac{v_i k_0}{2\pi \gamma_L} \right\rangle < \left(\frac{\delta}{\omega_{pe}} \right) \left(\frac{m_i}{m_e} \right)^{1/2} = \ll v_s > \left(\frac{\delta}{\omega_{pe}} \right) \left(\frac{m_i}{m_e} \right)^{1/2}. \quad (32)$$

В режиме развитой неустойчивости эта величина оказывается порядка $R_{Di} \leq 10^{-3}$, а число мод спектра ионной плотности не превышает величины $1 / R_{Di}$, что не противоречит проведенному анализу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Если плотность энергии интенсивной ленгмюровской волны заметно меньше плотности тепловой энергии плазмы, развитие модуляционной неустойчивости соответствует модели, описанной В.Е. Захаровым. Сравнение кинетических моделей описывающих поведение электронов и ионов с помощью кинетических

уравнений для функций распределения с гидродинамической моделью Захарова показало высокую чувствительность формирования каверн к процессам передачи энергии поля частицам. Отмечено, что кинетическое затухание поля на частицах способно искажать процесс модуляционной неустойчивости, возможно приводя к иным последствиям, в частности к появлению групп быстрых частиц и преждевременному разрушению каверн плотности. С другой стороны, представление электронов с помощью кинетического уравнения для функции распределения, а для ионов – с применением гидродинамических уравнений лучше описывает формирование каверн и, кроме того, позволяет выяснить характер передачи энергии ионам. К сожалению, проведя корректное сравнение, авторы [37, 38] не учли обратное влияние коротковолнового спектра на накачку, роль которой отводилась длинноволновой интенсивной ленгмюровской волне. Сравнение двух моделей Захарова гибридной и гидродинамической при одинаковых значениях параметров и одинаковых начальных условиях [41] показало, что количество каверн в гибридной модели оказалось заметно больше и они менее глубокие, чем в модели Захарова, причем интегральные показатели обеих моделей практически одинаковы. Недостатком работы этих авторов также является несамосогласованное описание, то есть отсутствие учета возбуждаемого спектра на волну накачки.

Если плотность энергии поля заметно превосходит плотность тепловой энергии плазмы, развитие модуляционной неустойчивости по крайней мере на начальной стадии процесса происходит по сценариям, представленным В.П. Силиным [10, 21]. Даже в одномерном численном моделировании процесса на базе обобщенных в работах [45, 46] гидродинамических уравнений Силина развивалась модуляционная неустойчивость и происходил частичный обмен энергией между ее коротковолновым спектром и интенсивной волной накачки. В гибридной модели Силина (электроны описаны гидродинамически, а ионы – крупными частицами) можно было наблюдать физический коллапс [40], обусловленный не только неравновесным начальным состоянием каверн (из-за нарушения баланса между ВЧ давлением и давлением плазмы) и эффектом выгорания поля, но и учетом инерции ионов. При этом ионная каверна «схлопывалась», то есть, переходила в режим пересечения траекторий частиц.

Рассмотрение процессов параметрической неустойчивости ленгмюровских волн в условиях применимости уравнений Захарова и уравнений Силина обычно рассматривалось теоретиками отдельно, хотя эксперименты часто не разделяли эти процессы. Поэтому было проведено сравнение этих моделей именно в отношении эффективности нагрева ионов и степени передачи энергии коллективным ионным движениям.

Анализ результатов численного моделирования показал, что в результате неустойчивости интенсивной длинноволновой ленгмюровской волны возбуждается ВЧ ленгмюровский коротковолновый спектр и коротковолновый НЧ спектр. Именно на этой стадии формируются каверны плотности плазмы, заполненные ВЧ полем. Затем ВЧ поле вследствие затухания на электронах, учтенного в данных моделях феноменологически, выгорает, передавая свою энергию электронам плазмы. Каверны в этих условиях «схлопываются», возбуждаются собственные НЧ волны (ионный звук), траектории ионов пересекаются и энергия «схлопнувшихся» каверн и НЧ спектра передается ионам. Ранее отмечалось [50, 51], что в горячей плазме доля энергии поля, которая передается ионам, пропорциональна отношению энергии поля к тепловой энергии плазмы. В холодной плазме, доля энергии поля, которая передается ионам, порядка отношения инкремента к частоте, или, что практически то же самое, пропорциональна кубическому корню из отношения масс электрона к иону. В случае тяжелых ионов энергия, переданная ионному компоненту, заметно меньше чем для случая легких ионов. Причем, доля энергии, переданная ионам в случае холодной плазмы обратно пропорциональна кубическому корню из массы ионов, а в случае горячей плазмы с ростом массы ионов падение доли энергии, переданной ионам оказывается несколько большим [51, 53]. Распределение ионов по энергиям в гибридной модели Силина характеризуется наличием большой доли быстрых частиц.

Интенсивность НЧ спектра (ионно-звуковые волны) в случае неизотермической плазмы (модель Захарова) одного порядка в широком интервале волновых чисел. В холодной плазме (модель Силина) в НЧ спектре доминируют длинноволновые колебания. Причем энергия НЧ поля оказывается значительно меньше конечной энергии ионов во всех рассмотренных случаях. Уменьшение энергии НЧ поля со временем происходит из-за передачи энергии ионам.

Уменьшение уровня поглощения ВЧ поля соответствует замедлению выгорания ВЧ поля в кавернах и уширяет спектр ВЧ мод, что приводит к углублению каверн плотности плазмы и к увеличению кинетической энергии выталкиваемых из каверн ионов. Отметим, что с уменьшением затухания ВЧ мод функция распределения ионов по скоростям в двух моделях по форме все ближе приближается к нормальному распределению, то есть к функции Максвелла. Максимальное значение энергии ионно-звуковых колебаний при уменьшении поглощения ВЧ поля для неизотермической плазмы практически не меняется, но формирование НЧ спектра ускоряется. В холодной плазме, где велика интенсивность именно длинноволновых НЧ колебаний, причем она увеличивается при уменьшении уровня поглощения ВЧ мод. Важно отметить, что с уменьшением поглощения ВЧ спектра энергия, в конечном итоге передаваемая ионам, возрастает.

Авторы выражают свою благодарность проф. Карасю В.И. за полезные замечания.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Silin V.P., Ruhadze A.A. Elektromagnitnye svoystva plazmy i plazmopodobnyh sred. – M.: Atomizdat, 1961. – 244s.
2. Basov N.G., Krohin O.N. Usloviya razogreva plazmy izlucheniem opticheskogo generatora // ZhJeTF. – 1964. – T.46. – Vyp.1. – S.171–175.
3. Dawson J.M. On the production of plasma by giant pulse lasers // Phys. Fluids. – 1964. – Vol.7. – No.7. – P.981–987.
4. Pashinin P.P., Prohorov A.M. Poluchenie vysokotemperaturnoj plotnoj plazmy pri lazernom nagreve special'noj gazovoj misheni. // ZhJeTF. – 1971. – T.60. – Vyp.5. – C.1630–1636.
5. Fajnberg Ja.B. Plazmennaja elektronika // Ukrainskij fizicheskij zhurnal. – 1978. – T. 23. – No. 11. – S. 1885.; Fajnberg Ja.B. Nekotorye voprosy plazmennoj elektroniki // Fizika plazmy. – 1985. – T. 11. – No. 11. – S. 1398-1410.
6. Kuzelev M.V., Ruhadze A.A. Elektrodinamika plotnyh elektronnyh puchkov v plazme. – M.: Nauka. Gl. red. fiz.–mat. lit., 1990.– 336s.
7. Shapiro V.D., Shevchenko V.I. Vzaimodejstvie volna-chastica v neravnovesnyh sredah // Izv. vuzov. Radiofizika. – 1976. – T. 19. – No. 5-6. – S. 787-791.
8. Kondratenko A.N., Kuklin V.M. Osnovy plazmennoj elektroniki. – M.: Energoatomizdat, 1988. – 320s.
9. Buc V.A., Lebedev A.N. Kogerentnoe izluchenie intensivnyh elektronnyh puchkov. – M. Izd. FIAN RAN, 2006. – 333 s.
10. Silin V.P. Parametricheskij rezonans v plazme // ZhETF. – 1965. – T. 48. – S. 1679.
11. Zaharov V.E. O spektre slaboj turbulentsnosti v plazme bez magnitnogo polja// ZhETF. – 1966. – T. 51. – S. 688.
12. Krueer W.L. et al. Anomalous high-frequency resistivity and heating of a plasma // Physical Review Letters. – 1970. – Vol. 24. – No. 18. – P. 987.
13. Aliev Ju.M., Silin V.P. Teorija kolebanij plazmy, nahodjashhejsja v vysokochastotnom elektricheskom pole // ZhETF. – 1965. – T. 48. – No. 3. – S. 901-912.
14. Gorbunov L.M., Silin V.P. O neustojchivosti plazmy v sil'nom VCh-pole // ZhETF. – 1965. – T. 49. – S. 1973-1982.
15. Silin V.P. Anomal'naja nelinejnaja dissipacija SVCh voln v plazme // Uspehi fizicheskikh nauk. – 1971. – T. 104. – No. 8. – S. 677-678.
16. Krueer W.L. Heating of underdense plasmas by intense lasers. – Princeton Univ., NJ (USA). Plasma Physics Lab, 1972.
17. Ivanov A.A., Nikulin M.G. Nelinejnoe vzaimodejstvie lengmjurovskih voln bol'shoj amplitudy v besstolknovitel'noj plazme // ZhETF. – 1973. – T. 65. – No. 1. – S. 168–174.
18. Kim H.C., Stenzel R.L., Wong A.Y. Development of "Cavitons" and Trapping of rf Field // Physical Review Letters. – 1974. – VOL. 33. – No. 15. – P. 886.
19. Vyacheslavov L.N. et al. Spectra of developed Langmuir turbulence in a nonisothermal magnetized plasma // Physics of Plasmas (1994-present). – 1995. – Vol. 2. – No. 6. – P. 2224-2230.
20. McFarland M.D., Wong A.Y. Spectral content of strong Langmuir turbulence in the beam plasma interaction // Physics of Plasmas (1994-present). – 1997. – Vol. 4. – No. 4. – P. 945-955.
21. Andreev I.E., Silin V.P., Stenichikov G.L. O nasyshhenii parametricheskoy neustojchivosti plazmy v sil'nom elektromagnitnom pole // Fiz. plazmy. – 1977. – T. 3. – S. 1088-1096.
22. Kovrizhnyh L.M. Moduljacionnaja neustojchivost' i nelinejnye volny v holodnoj plazme // Fizika plazmy. – 1977. – T.3. – Vyp.5. – S. 1097–1105.
23. Buchel'nikova N.S., Matochkin E.P. Neustojchivost' i zatuhanie odnomernykh lengmjurovskih voln // AN SSSR, In-t. jadernoj fiziki – Preprint No. 79–115. – 1979. – S. 20.
24. Antipov S.V., Nezlin M.V., Snezhkin E.N., Trubnikov A.S. Vozbuzhdenie lengmjurovskih solitonov monoenergeticheskim elektronnyim puchkom // ZhETF. – 1979. – T. 76. – S. 1571.
25. Sagdeev R.Z., Shapiro V.D., Shevchenko V.I. Dissipacija moshhnoj elektromagnitnoj volny v neodnorodnoj plazme i «sverhsil'naja» plazmennaja turbulentnost' // Fizika plazmy. – 1980. – T.6. – S. 377.
26. Wong A.Y., Cheung P.Y. Three-Dimensional Self-Collapse of Langmuir Waves // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 52 – P.1222.
27. Cheung P.Y., Wong A.Y. Nonlinear evolution of electron electron-beam-plasma interaction // Phys. Fluids. – 1985. – Vol. 28. – P. 1538.
28. Karfidov D.M., Rubenchik A.M., Sergejchev K.F., Sychev I.A. Sil'naja lengmjurovskaja turbulentnost', vozbuhdajemaja v plazme elektronnyim puchkom // ZhETF. – 1990. – T. 98. – S. 1592.
29. Zaharov B.E., Pushkarev A.H., Rubenchik A.M., Sagdeev R.Z., Shvec V.F. Kinetika trehmernogo lengmjurovskogo kollapsa // ZhETF. – 1989. – T. 96 – S. 591.
30. Dawson J.M. Some Investigations of Plasma Instabilities in One-Dimensional Plasmas. – Princeton, N.J.: Princeton University, Plasma Physics Laboratory, 1962. – P. 45.
31. Mei-Mei Shen, Nicholson D.R. Numerical comparison of strong Langmuir turbulence model // Phys. Fluids. – 1987. – Vol.30. – No.4. – P. 1096–1103.
32. Degtjarev L.M., Sagdeev R.Z., Solov'ev G.I., Shapiro V.D., Shevchenko V.I. Odnomernaja turbulentnost' lengmjurovskih voln // Fizika plazmy. – 1980. – No.6. – C. 485–508.
33. Galeev A.A., Sagdeev R.Z., Sigov Ju.S., Shapiro V.D., Shevchenko V.I. Nelinejnaja teorija moduljacionnoj neustojchivosti lengmjurovskih voln // Fizika plazmy. – 1975. – T.1. – No.1. – S.10–20.
34. Sigov Ju.S., Hodyrev Ju.V. Odnomernyj kvazikollaps lengmjurovskih voln pri parametricheskom vozdejstvii na plazmu // DAN SSSR. – 1976. – T. 229. – S.833–836.
35. Sigov Yu.S., Zakharov V.E. Strong turbulence and its computer simulation // J. de Physique. – 1979. – Vol.40. – No. C7. – P.63–79.
36. Robinson P.A., De Oliveira G.I. Effect of ambient density fluctuations on Langmuir wave collapse and strong turbulence // Physics of Plasmas (1994-present). – 1999. – Vol. 6. – No. 8. – P. 3057-3065.
37. Wang J.G. et al. One - dimensional simulations of Langmuir collapse in a radiation - driven plasma // Physics of Plasmas (1994-present). – 1994. – Vol. 1. – No. 8. – P. 2531-2546.
38. Wang J.G. et al. Comparison of Zakharov simulation and open boundary Vlasov simulation of strong Langmuir turbulence //

- Physics of Plasmas (1994-present). – 1996. – Vol. 3. – No. 1. – P. 111-121.
39. Kuklin V.M., Panchenko I.P., Sevidov S.M. Neustojchivost' intensivnoj lengmjurovskoj volny v holodnoj plazme. // Radiotekhnika i elektronika. – 1988. – T.33. – Vyp.10. – S. 2135–2140.
 40. Chernousenko V.V., Kuklin.V.M., Panchenko I.P. The structure in nonequilibrium media // In book: Acad. Nauk USSR, ITP, Nauk. Dumka: The integrability and kinetic equations for solitons. – 1990. – P. 472.
 41. Clark K.L., Payne G.L., Nicholson D.R. A hybrid Zakharov particle simulation of ionospheric heating // Phys. Fluids B. - 1992. – Vol. 4. – No. 3.– P.708–718.
 42. D'jachenko A.I., Zaharov V.E., Rubenchik A.M., Sagdeev R.Z., Shvec V.F. Dvumernyj lengmjurovskij kollaps i dvumernye lengmjurovskie solitony // Pis'ma v ZhETF. – T.44. – Vyp. 11. – S. 504–507.
 43. Henri P. et al. Low-energy Langmuir cavitons: Asymptotic limit of weak turbulence // EPL (Europhysics Letters). – 2011. – Vol. 96. – No. 5. – S. 55004.
 44. Kuklin V.M. Similarity of 1D Parametric Instability Description of Langmuir Waves // The Journal of Kharkiv National University, Physical Series: Nuclei, Particles, Fields. – 2013. – No.1041. – Iss.2 (58). – P.20–32.
 45. Kuklin V.M. Instability of intensive longitudinal oscillations and structures in plasma // Proc. Contr. Papers. Int. Conf. on Plasma Physics, Kiev, Apr. 6–12. – 1987. – Vol.4. – P. 101–104.
 46. Kuklin V.M. Sevidov S.M. K nelinejnoj teorii ustojchivosti intensivnyh kolebanij holodnoj plazmy // Fizika plazmy. – 1988. – T.14. – Vyp. 10. – S. 1180–1185.
 47. Koch P., Albritton J. Electron and ion heating through resonant plasma oscillations // Physical Review Letters. – 1974. – Vol. 32. – No. 25. – P. 1420.
 48. Bulanov S.V., Sasorov P.V. Ob uskorenii ionov na nelinejnoj stadii bunemanovskoj neustojchivosti // Fizika plazmy. – 1986. – T.12. – No. 1. – S. 54-56.
 49. Batanov G.M. i dr. Lengmjurovskie volny bol'shoj amplitudy i uskorenie chastic v plazmennoj korone SVCh-razrjada // Fizika plazmy. – 1986. – T. 12. – No. 5. – S. 552-562.
 50. Belkin E.V., Kirichok A.V., Kuklin V.M., Pryjmak A.V., Zagorodny A.G.. Dynamics of ions during development of parametric instability of Langmuir waves // VANT, Series “Plasma Electronics and New Methods of Acceleration”. – 2013. – No.4 (86). – Iss. 8. – P. 260–266.
 51. Zagorodnij A.G., Kirichok A.V., Kuklin V.M., Prijmak A.V. Osobennosti nagreva ionov pri razvitii neustojchivosti intensivnyh lengmjurovskih kolebanij v plazme // Fizicheskie osnovy priborostroenija. – 2014. – T.3. – No.1. – S. 58-69.
 52. Kuznetsov E.A. On averaged description of Langmuir waves in plasma // Sov. Plasma Physics. – 1976. – Vol. 2. – No.2. – P. 327–333.
 53. Kirichok A.V., Kuklin V.M., Pryjmak A.V., Zagorodny A.G. Kinetics of ions during the development of parametric instability of intensive Langmuir waves in plasma // arXiv preprint arXiv: 1411.3011. – 2014.

PACS: 29.20. Ej

COMPACT LINEAR ION ACCELERATOR TO SMALL AND AVERAGE ENERGY OF APPLICATION APPOINTMENT

S.A. Vdovin, Ye.V. Gussev, M.G. Shulika

National Science Center "Kharkov Institute of Plasma and Technology"

Ukraine, Kharkov, Akademicheskaya Str.1

e-mail: vdovin@kipt.kharkov.ua

Received June 1, 2015

For a number of years NSC KIPT developed and researched compact linear accelerators based on H - resonators in which the stability of the particle dynamics is provided by a high-current version alternative - phase focusing - modified alternative - phase focusing. The paper sets out the main principles of the accelerating channel in H - cavities with modified alternative - phase focusing and briefly summarizes the main results of the research.

KEY WORDS: particle, field, ion, resonator, wave, accelerator, focusing, phase

МАЛОГАБАРИТНІ ЛІНІЙНІ ПРИСКОРЮВАЧІ ІОНІВ НА МАЛІ ТА СЕРЕДНІ ЕНЕРГІЇ ПРИКЛАДНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

С.О. Вдовін, Є.В. Гусєв, М.Г. Шуліка

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»,

Україна, Харків, вул. Академічна, 1

Протягом ряду років в ННЦ ХФТІ розроблюються та досліджуються малогабаритні лінійні прискорювачі на основі Н – резонаторів, в яких стійкість динаміки частинок забезпечується потужнострумівним варіантом змінно-фазового фокусування – модифікованим змінно-фазовим фокусуванням. У роботі викладено основні принципи побудови прискорюючих каналів в Н – резонаторах з модифікованим змінно-фазовим фокусуванням та коротко узагальнені основні результати досліджень.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: частинка, поле, іон, резонатор, хвиля, прискорювач, фокусування, фаза

МАЛОГАБАРИТНЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ УСКОРИТЕЛИ ИОНОВ НА МАЛЫЕ И СРЕДНИЕ ЭНЕРГИИ ПРИКЛАДНОГО НАЗНАЧЕНИЯ

С.А. Вдовин, Е.В. Гусев, Н.Г. Шулика

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

Украина, Харьков, ул. Академическая, 1

В течение ряда лет в ННЦ ХФТИ разрабатываются и исследуются малогабаритные линейные ускорители на основе Н – резонаторов, в которых устойчивость динамики частиц обеспечивается сильноточным вариантом переменного – фазовой фокусировки – модифицированной переменного – фазовой фокусировкой. В работе изложены основные принципы построения ускоряющих каналов в Н – резонаторах с модифицированной переменного – фазовой фокусировкой и кратко обобщены основные результаты исследований.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: частица, поле, ион, резонатор, волна, ускоритель, фокусировка, фаза

Ускорители ионов давно перестали быть только орудием физического эксперимента в фундаментальных исследованиях. Пучки ускоренных ионов широко используются в научных исследованиях, в ядерной энергетике, технике, медицине, биологии, геологии, как технологические единицы, для обеспечения различных производственных процессов [1,2]. Сферы использования ускорителей постоянно расширяются. Отвлекаясь от конкретных целей применения ускорителей и схем их построения, можно сформулировать ряд общих требований к ускорителям прикладного назначения. Ускоритель должен быть компактным, относительно дешевым, надежным в работе, простым в эксплуатации и обладать высокой производительностью. Ускоряющая система должна обеспечивать приемлемые коэффициенты захвата частиц в режим ускорения, при низковольтной (до $150 \cdot 10^3$ В) инъекции, высокие значения темпа ускорения, импульсного и среднего тока пучка и возможность совмещения ускоряющих и фокусирующих функций в одной системе. Ускоренный пучок должен быть однородным по энергии и иметь эмиттанс, при котором потери частиц при транспортировке минимальны.

Приведенные требования противоречивы и взаимосвязаны. Удовлетворить всему разнообразию параметров, необходимых для создания конкретной установки, при использовании одного типа ускорителя, использования одной разновидности ускоряющей структуры или схемы построения ускорителя невозможно. Поэтому необходим поиск вариантов ускоряющих структур и принципов построения ускорительных установок, характеристики которых могли бы удовлетворять конкретным целевым назначениям.

Современные линейные резонансные ускорители ионов с трубками дрейфа, несмотря на несомненные достоинства, обладают рядом свойств, которые ограничивают их технологическое применение. Ускорение пучка заряженных частиц в линейных резонансных ускорителях осуществляется продольным электрическим

полем, которое создается между трубками дрейфа в результате возбуждения в цилиндрическом резонаторе ускорителя высокочастотной (ВЧ) электромагнитной волны на основной моде E_{010} . Распределение амплитуды электрического поля и длина периода ускорения подбираются такими, чтобы частицы проходили ускоряющий период в определенной фазе, называемой равновесной, а фаза имела необходимое значение. Во всех зазорах электрическое поле имеет одно и то же направление (2π - вид колебаний).

В тормозящей фазе электрическое поле экранируется трубками дрейфа. Для ускорения используется только один полупериод электромагнитной волны. В диапазоне энергий частиц от $1,12 \cdot 10^{-13}$ до $320 \cdot 10^{-13}$ Дж/нуклон (от 0,7 до 200 МэВ/нуклон), где ускорители такого типа наиболее эффективны, движение ионов слаборелятивистское, скорость частиц v растет по мере роста энергии. Результативное ускорение возможно лишь при наличии в ускоряющем электрическом поле компоненты, которая распространяется с фазовой скоростью $\beta = v/c$ (c - скорость света), то есть синхронно с пучком. При этом, для обеспечения синхронизма необходимо, чтобы на ускоряющем периоде трубка дрейфа составляла $0,75\beta\lambda$. У такой компоненты распределение продольного поля по радиусу пропорционально отношению радиуса апертуры к величине $\beta\lambda$ (λ - длина волны ВЧ - колебаний). При большой величине отношения возникает неравномерность ускорения по сечению пучка из-за убывания электрического поля от краев трубок дрейфа к оси ускоряющего канала. Поэтому современные линейные резонансные ускорители ионов работают в диапазоне длин волн с $\lambda \geq 1,5$ м. Резонансная частота E_{010} волны $\omega_{010} = 2,405c/R$ (R - радиус резонатора), т.е. поперечный размер резонатора определяется длиной волны и равен примерно $2R = \lambda/1,3$. Возможности повышения β связаны с необходимостью увеличения напряжения на инжекторе ионов до $(600..800) \cdot 10^3$ В, что дополнительно увеличивает размеры, а вместе с ними и стоимость ускорителя [3].

Следует отметить и такую особенность, как возбуждение в резонаторе наряду с основной модой колебаний близких по частоте соседних мод. Наличие таких мод ухудшает параметры ускоряющей структуры и требует предельно высокой точности изготовления и настройки всего ускорительного тракта и системы термостатирования ускоряющей системы, а иногда и введения в полость резонатора дополнительных стабилизирующих элементов, число которых может быть достаточно велико.

Движение частиц вдоль ускорительного тракта в процессе ускорения в радиальном направлении неустойчиво. Стабилизация движения пучка по радиусу осуществляется различного рода фокусирующими устройствами, которые, как правило, размещаются в трубках дрейфа. Наиболее надежные и универсальные фокусирующие линзы являются непростыми в конструктивном отношении устройствами. Это значительно усложняет конструкцию трубок дрейфа и всего ускорителя в целом, поскольку дополнительные фокусирующие устройства требуют отдельного хорошо стабилизированного питания, сложной системы охлаждения и термостатирования [4].

Существенно уменьшить размеры ускорителя, упростить его конструкцию и понизить энергию инжекции можно путем перехода к резонаторам на волнах H - типа.

Цель настоящей работы – по результатам исследований, проведенных в ННЦ ХФТИ, изложить особенности и алгоритм построения ускоряюще-фокусирующих каналов в ускорителях на основе H – резонаторов, в которых устойчивость динамики ускоряемых частиц обеспечивается сильноточным вариантом переменного – фазовой фокусировки – модифицированной переменного – фазовой фокусировкой.

H – РЕЗОНАТОРЫ

В цилиндрических резонаторах самый низкий по частоте тип колебаний - H_{11} не имеет продольной составляющей высокочастотного электрического поля и не может быть непосредственно использован для ускорения ионов. Для создания продольного электрического поля резонатор нагружается специальной нагрузкой. В качестве такой нагрузки используются трубки дрейфа закрепленных на штангах [5] или сплошных держателях (гребенках) [6], установленных попарно на противоположных по диаметру образующих цилиндра резонатора. При таком расположении трубки дрейфа подключаются к точкам с постоянной амплитудой ВЧ - поля, то есть, между двумя соседними трубками прикладывается одинаковое напряжение по всей длине резонатора. Эти резонансные структуры называют H - резонаторами, а соответствующие ускорители - ускорителями на H - волне. Достоинствами структур такого типа являются малые габаритные размеры, высокие значения шунтового сопротивления, большой темп ускорения и низкая энергия инжекции по сравнению с ускорителями на волнах E -типа.

В H -резонаторах, нагруженных трубками дрейфа на сплошных подвесах-гребенках диаметр резонатора $2R \approx \lambda/(5..6)$ примерно в четыре раза, а объем примерно в 20...30 раз меньше, чем в ускорителях с E -типом колебаний. Уменьшение габаритных размеров существенно снижает затраты на создание и эксплуатацию ускорителя. Высокочастотные энергетические потери в резонаторе зависят от величины шунтового сопротивления. Они тем меньше, чем выше сопротивление. Темп ускорения повышается за счет того, что ускорение осуществляется знакопеременным полем. В каждый последующий зазор частицы попадают в ускоряющей фазе ВЧ – поля (π -тип колебаний).

Длина трубок дрейфа для обеспечения синхронизма должна быть $0,25 \beta\lambda$. По мере роста энергии в процессе ускорения, скорость частиц возрастает, соответственно увеличивается длина ускоряющего периода

(расстояние между центрами трубок дрейфа либо центрами ускоряющих зазоров). С ростом длины ускоряющего периода величина усредненной по периоду ускорения продольной составляющей напряженности электрического ВЧ - поля E_z уменьшается, что приводит к падению темпа ускорения. Вместе с ослаблением продольной составляющей E_z убывает и поперечная составляющая E_r , необходимая для подавления кулоновского расталкивания частиц пучка. Эти эффекты существенно проявляются в длинных ускоряющих секциях, в которых скорость частицы изменяется на порядок и более. Поддержание высоких значений темпа ускорения и кулоновского предела ускоряемого пучка требует принятия специальных мер для сохранения равномерного распределения электрического поля вдоль резонатора: секционирования всего ускорителя, либо компенсации ослабления напряженности поля путем изменения величины емкостной нагрузки вдоль ускорительного тракта (варьирования размерами трубок дрейфа, конфигурацией гребенок и т.д.). Второй вариант предпочтительнее, поскольку первый требует дополнительных источников ВЧ - питания, что усложняет и удорожает ускоритель.

H -резонаторы и ускорители на их основе последовательно разрабатываются и исследуются с начала 60-х годов в Украинском физико-техническом институте (в настоящее время - ННЦ Харьковский физико-технический институт). На раннем этапе исследований ускоряющие структуры создавались путем длительного экспериментального подбора из-за невозможности точного расчета их характеристик. Тем не менее, эти первые эксперименты показали, что в широком диапазоне энергий в пределах $0,05 < \beta < 0,35$ величина шунтового сопротивления постоянна масштаба $R_{ш. \omega} = (45...50) \cdot 10^6$ Ом/м и только после достижения значения $\beta \geq 0,35$ начинается его уменьшение до $(20...25) \cdot 10^6$ Ом/м при $\beta = 0,5$. Повышение шунтового сопротивления возможно при концентрации электрического поля исключительно в области ускоряющего зазора. Наиболее эффективны для этого оказались ускоряющие структуры с трубками дрейфа на сплошных держателях-подвесах. Электродинамические характеристики (ЭДХ) ускоряющей структуры в этом случае определяются не столько размерами резонатора, сколько параметрами резонансной нагрузки [7-11].

В ходе дальнейших исследований H – резонаторов было обнаружено, что при одинаковой напряженности электрического поля в ускоряющих зазорах шунтовое сопротивление в 4...5 раз меньше чем в структурах с постоянным напряжением между трубками дрейфа (спадающее электрическое поле).

Изучение H – резонаторов со спадающим электрическим полем показало, что при сохранении высокого шунтового сопротивления, значительно упрощается процесс настройки таких резонаторов на рабочий режим и компенсации возмущений ускоряющего напряжения сильноточными пучками.

На основании данных, полученных в ходе начальных исследований, был создан малогабаритный линейный ускоритель дейтронов МЛУД-3 [12-13]. Несмотря на скромные характеристики, ускоритель имел практическое значение, использовался в составе аналитического комплекса по исследованию свойств материалов в Институте неорганических материалов им. Бочвара, г. Москва (в настоящее время это ГНЦ РФ ВНИИИМ) [14] и был отмечен медалью ВДНХ СССР.

ПЕРЕМЕННО – ФАЗОВАЯ ФОКУСИРОВКА

Дефокусирующее влияние электрического поля в на ускорителе МЛУД-3 компенсировалось вольфрамовыми сетками, размещенными во входных апертурах трубок дрейфа. Величина ускоренного тока ограничивалась в основном допустимой тепловой нагрузкой и прозрачностью сеток. Улучшение параметров ускоренного пучка требовало применения более совершенных методов фокусировки. Малые размеры трубок дрейфа в ускорителях на основе H – резонаторов исключали возможность использования квадрупольных линз, а высокочастотная квадрупольная фокусировка приводила бы к снижению темпа ускорения, увеличению энергетических затрат на создание ускоряющее - фокусирующее поля и снижению электрической прочности ускоряющих промежутков. Наиболее привлекательным способом, который способен обеспечить устойчивость движения пучка ионов в процессе ускорения, для малогабаритных линейных ускорителей представляется способ фокусировки самим ускоряющим полем, без привлечения дополнительных устройств и элементов. Способ основан на идее периодического изменения вдоль ускорительного тракта синхронной фазы для придания силам, действующим на частицу, знакопеременного фазизирующего и фокусирующего воздействия [15,16].

Уравнение движения заряда в высокочастотном поле при отсутствии внешних фокусирующих устройств:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} = \frac{1}{m_0 \gamma} \mathbf{F}_\omega, \quad (1)$$

m_0 – масса заряда, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ – фактор Лоренца, \mathbf{F}_ω – сила, действующая на частицу со стороны ВЧ поля.

Для частиц с малым отклонением текущей фазы φ частицы от синхронной фазы φ_s , отсчитанной от максимума амплитуды ВЧ - поля, в окрестности продольной оси, где радиальное электрическое поле уже не равно нулю

$$E_r = -\frac{r^*}{2} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_{z=z_s} \quad (2)$$

(r^* - отклонение частицы от оси в поперечной плоскости, z_s – продольная координата синхронной частицы), при анализе продольного (фазового) и поперечного движений, уравнение (2) обычно записывают в виде системы линейных уравнений с периодическими коэффициентами (уравнений Хилла):

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \Omega_x^2 x &= 0; \\ \ddot{y} + \Omega_y^2 y &= 0; \\ \ddot{q} + \Omega_q^2 q &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь x, y – координаты в поперечной плоскости, q – отклонение частицы от синхронной в продольном направлении,

$$\begin{aligned} \Omega_x^2 &= \frac{e}{m_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} \right); \\ \Omega_y^2 &= \frac{e}{m_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_z}{\partial z} \right); \\ \Omega_q^2 &= \frac{e}{m_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

- соответствующие частоты фазовых колебаний. Из уравнений движения (3) следует равенство [17]:

$$\Omega_x^2(t) + \Omega_y^2(t) + \Omega_z^2(t) = 0. \quad (5)$$

Следовательно, в электростатических полях или в каждый определенный момент времени устойчивое движение частиц возможно только при

$$\Omega_x^2 = \Omega_y^2 = \Omega_z^2 = 0 \quad (6)$$

В аксиально-симметричном ускоряющем поле

$$\Omega_x^2(t) = \Omega_y^2(t) = -\frac{1}{2} \Omega_q^2(t). \quad (7)$$

С учетом (7) уравнения (3) принимают вид

$$\begin{aligned} \dot{r} - \frac{1}{2} \Omega_q^2(t) r &= 0; \\ \ddot{q} + \Omega_q^2(t) q &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

В линейном приближении в поле бегущей электромагнитной волны с продольной компонентой электрического поля E_z [17]

$$E_z = E_0 \cos \left(\omega t - \omega \int_0^{z(t)} \frac{dz}{v_\phi(z)} \right) \quad (9)$$

$\Omega_q^2(t)$ связан с основными параметрами ускоряющего канала следующим образом:

$$\Omega_q^2(t) = -\frac{e}{m_0} \frac{2\pi \sin \varphi_i E_i T_i \eta(z)}{\beta_s \lambda} \quad (10)$$

Здесь E_i – амплитуда поля в i -том зазоре, $T_i = \frac{\sin(\pi \alpha_i)}{\pi \alpha_i}$ – фактор пролетного времени, $\alpha_i = \frac{g_i}{\beta_s \lambda}$ – коэффициент зазора [19], $\beta_s = v/c$ – относительная скорость синхронной частицы, η_s – равна 1 в ускоряющем зазоре и 0 в трубках дрейфа.

Изменяя периодически вдоль ускорительного тракта знак коэффициента Ω_q^2 можно обеспечить совместно продольную и поперечную устойчивость движения частиц. Практически такое изменение осуществляется при помощи трубок дрейфа различной длины. Данный способ фокусировки получил название переменного-фазовая (ПФФ) или фазопеременная фокусировка (ФПФ). ПФФ оказывает воздействие не только на поперечное, но и на продольное движение, в отличие от ускорителей классического типа, где в продольном направлении движение частиц пучка определяется автофазировкой. При ПФФ ускорение, фокусировка и фазировка осуществляется различными компонентами ускоряющего ВЧ - поля. Поэтому совместная поперечная и продольная

устойчивость обеспечивается только в узком диапазоне параметров, а фазовая протяженность области захвата не превышает нескольких градусов. Эти обстоятельства не позволяют получить ускоренный ток приемлемых величин. Существенно расширить область захвата и поднять величину ускоренного тока до десятков миллиампер возможно, если вместе с периодическим изменением знака равновесной фазы, учитывая несимметричность уравнений (8), периодически по специальным законам изменять еще один из параметров ускорителя. Параметрами могут быть, например, амплитуда ускоряющего поля E_i , абсолютное значение синхронной фазы φ_s , или постоянная составляющая синхронной фазы φ_0 . Такой метод обеспечения устойчивого движения частиц, названный ассиметричной фазопеременной фокусировкой (АФПФ), нашел практическое применение [18].

В ННЦ ХФТИ разработан еще более сильноточный вариант фокусировки, получивший название модифицированная переменнo-фазовая фокусировка (МПФФ) и удостоенный Государственной премии Украины в области науки и техники [19]. Сущность метода заключается в том, что расчет ускоряющей структуры проводится не по одной расчетной или синхронной частице, а по некоторому начальному ансамблю частиц с учетом его фазовой протяженности [20-24]. Применение модифицированной переменнo-фазовой фокусировки позволило на порядок по сравнению с АФПФ увеличить ускоренный ток [25-26].

Модифицированная переменнo-фазовая фокусировка это фокусировка, при которой устойчивость движения частиц поддерживается в среднем на группе ускоряющих периодов. Ускоряющий период содержит трубку дрейфа и зазор между соседними трубками. Каждый период обеспечивает устойчивость лишь в одной плоскости движения частиц – продольной (фазовой) или радиальной. Ускоряющие периоды, объединены в группу под названием период фокусировки. Согласование условий движения частиц от периода к периоду обеспечивает устойчивость пучка в целом на периоде фокусировки в обеих плоскостях.

Параметрами, которые определяют устойчивость движения пучка, являются фаза синхронной частицы и напряженность ускоряющего поля в зазоре. Поскольку на входе в первый зазор невозможно сформировать пучок с необходимыми для устойчивого движения фазовыми характеристиками, первый зазор выбирается группирующим частицы (фазирующим). Для увеличения области захвата по фазам и обеспечения линейности сил действующих на пучок со стороны высокочастотного поля, значение синхронной фазы выбирается близким 90^0 или равным ему. Учитывая неодинаковую жесткость для радиального и продольного движений и то, что уровень поля в первом, фазирующем зазоре обычно не удается сделать более $0,5E_0$ (E_0 – амплитуда электрического поля), далее, в период фокусировки включаются два фокусирующих периода и половина зазора фазирующего с полем $\sim E_0$. Согласование условий движения в процессе движения частиц по периоду фокусировки производится подбором синхронной фазы и амплитуды поля в зазоре. Затем выстраивается следующий период фокусировки, полагаясь на аналогичные предпосылки. Он начинается половиной фазирующего зазора, оставшегося от предыдущего периода фокусировки, и включает несколько последовательно расположенных фокусирующих и фазирующих зазоров, синхронная фаза и уровень поля в которых выбираются так, чтобы движение в целом по периоду фокусировки было устойчивым. Другими словами на фазовой плоскости частица, пройдя полный период фокусировки и получив прирост энергии, должна вернуться в начальную точку или очень близкую к ней. И так далее до достижения заданной энергии.

ОСОБЕННОСТИ ПОСТРОЕНИЯ УСКОРЯЮЩЕГО КАНАЛА С МПФФ

Построение ускоряюще-фокусирующего канала с МПФФ аналитическими методами практически невозможно. Это связано со сложностью определения реальной геометрии ускоряющих периодов и, следовательно, множества возможных вариантов значений синхронных фаз. Традиционные методы расчета [30,31] ускоряющего канала с МПФФ непригодны потому, что закон распределения синхронных фаз в ускоряющем канале не может быть задан заранее. Его необходимо найти в процессе решения самосогласованной задачи - вычисления размеров ускорительного тракта с одновременным определением закона распределения синхронных фаз и амплитуд высокочастотного поля. Для решения этой задачи в ННЦ ХФТИ была создана численная методика расчета ускоряющих резонаторов. Расчеты проводились с использованием метода макрочастиц [28-35, 37-40]. Суть метода макрочастиц заключается в том, что наблюдение производится за большими группами частиц с тем же отношением заряда к массе, что и для реальных частиц. При условии сохранения плотности заряда, собственное поле и динамика макрочастиц достаточно хорошо отражают реальный пучок.

Алгоритм расчета имеет такую последовательность:

- на входе в канал формируется пучок с соответствующими параметрами (ток, энергетический разброс, фазовый портрет и др.) исходя из требований, предъявляемых к ускоряющей структуре;
- производится начальное заполнение фазового объема с требуемым распределением фазовой плотности частиц при помощи генератора случайных чисел;
- производится распределение плотности объемного заряда в узлах эйлеровой решетки, наложенной на пучок исходя из пространственных координат макрочастиц;
- решается уравнение Пуассона с соответствующими граничными условиями для нахождения потенциала в узлах решетки;

– численным дифференцированием потенциала, найденного в узлах решетки, определяются распределения компонент E_z и E_r напряженности электрического поля в области пространства занимаемого пучком;

– решаются уравнения движения частиц во внешнем и собственном электрических полях. На основании этих решений определяется распределение величин синхронных фаз φ_s , длин трубок дрейфа и зазоров между ними, т.е. определяется геометрии ускоряющего тракта.

На начальном этапе количество модельных частиц (равномерно заряженных эллипсоидов), ограничивается возможностью оператора в масштабе реального времени контролировать параметры их движения и временем, необходимым для предварительного определения распределения фаз в ускоряющих периодах. Численные исследования ведутся в режиме диалога оператора и вычислительной машины и основаны на том, что значение синхронной фазы φ_s в каждом ускоряющем зазоре данного периода ускорения выбирается исходя из анализа параметров ансамбля частиц на выходе периода, параметры которого первоначально были заданы на входе периода. Начав движение частиц, оператор в буквальном смысле “проводит” первоначально выбранный ансамбль частиц, контролируя параметры движения так, чтобы этот ансамбль находился в границах, определяемых аксептансом ускоряюще-фокусирующего канала. Это позволяет оперативно оценить возможности канала.

На следующем этапе анализируются изменения характеристик пучка в процессе его движения в ускоряюще-фокусирующем канале. Затем, путем последовательных приближений уточняются параметры самого канала - размеры ускоряющих периодов, распределение синхронных фаз и относительное распределение амплитуды ускоряющего поля в зазорах. То есть, в процессе исследования динамики пучка одновременно производится моделирование ускоряющего тракта (изменение его параметров), позволяющее оптимизировать характеристики ускоряемого пучка.

Численное исследование динамики частиц в ускоряюще-фокусирующем канале позволяет, до изготовления рабочего образца резонатора, определить размеры областей устойчивого продольного и поперечного движения, аксептанс, характеристики пучка ионов - кулоновский предел ускоренного тока, энергетический разброс, эмиттанс и т.д. Для определения истинных параметров пучка, проводятся уточняющие численные исследования с использованием результатов, полученных на этапах экспериментального моделирования ускоряющего резонатора. Главными из них являются реальное распределение величины ускоряющего поля по периодам ускорения и резонансная частота.

Для создания ускоряюще-фокусирующего канала с оптимальными параметрами необходимо соблюдать следующие условия. В ускоряющих периодах с отрицательным значением синхронной фазы φ_s , обеспечивающих группировку (фазировку) частиц, абсолютная величина фазы $|\varphi_{s1}|$ должна быть больше чем в ускоряющих периодах с положительным значением синхронной фазы φ_{s2} , которая обеспечивает радиальную фокусировку. Количество ускоряющих периодов с положительным значением фазы φ_{s2} , для усиления жесткости радиальных сил в периоде фокусировки в 1,5...2,5, должно превышать количество периодов с отрицательным значением синхронной фазы φ_{s1} .

В зависимости от энергии частиц число ускоряющих периодов в фокусирующем периоде не остается одинаковым, так как при $\varphi_s < 0$ фазировочное (одновременно дефокусирующее) или при $\varphi_s > 0$ фокусирующее (одновременно дефазировочное) действие электрического поля в ускоряющих периодах уменьшается с ростом энергии частиц. Обычно диапазон изменения значений фазы φ_{s1} выбирается в пределах от -90° до -60° , а диапазон значений фазы φ_{s2} - в пределах $+35^\circ$... $+70^\circ$, в зависимости от распределения напряженности электрического поля вдоль оси секции, энергии частиц, степени их группировки и ряда других факторов. На конкретные значения синхронных фаз в указанных диапазонах оказывает влияние степень группировки частиц в пучке на входе в период фокусировки. Минимизация потерь частиц достигается строгим согласованием аксептанса фокусирующего периода с эмиттансом пучка на его входе. Таким образом, вдоль ускоряющего тракта для каждого диапазона энергии необходимо разрабатывать конкретный период фокусировки.

Превышение в периоде фокусировки оптимального числа ускоряющих периодов с радиальной фокусировкой приводит к увеличению амплитуды продольных колебаний а, следовательно, к дефазировке частиц сгустка и выходу части ионов из синхронизма с электромагнитной волной. Наиболее приемлемой является структура фокусирующего периода типа *DFFFD* в начале ускорительного тракта, которая по мере роста энергии частиц трансформируется в *DDFFFFDD*. Здесь *D* – периоды ускорения с $\varphi_s < 0^\circ$, т.е. обеспечивающие группировку частиц; *F* – периоды ускорения с радиальной фокусировкой, т.е. периоды в которых $\varphi_s > 0^\circ$. При этом в пределах периода фокусировки число ускоряющих периодов с радиальной фокусировкой должно быть больше числа ускоряющих периодов, обеспечивающих продольную устойчивость. С ростом энергии (жесткости пучка) в периоде фокусировки необходимо увеличивать как число *F*-, так и *D*-ускоряющих периодов. В отличие от классических ускоряющих структур, в случае использования ускоряющего канала с МПФФ, структура периода фокусировки не является постоянной.

Увеличение числа ускоряющих периодов в фокусирующем периоде является положительным качеством метода МПФФ. Оно обеспечивает гибкость в построении периода фокусировки, что позволяет более точно

выбрать его параметры для увеличения предела ускоряемых токов, расширения диапазона энергии и сорта ускоряемых частиц.

При МПФФ ускорение ионов происходит как в фазирующих, так и в фокусирующих периодах. Но при указанном выборе значений синхронной фазы основной прирост энергии частиц происходит в ускоряющих периодах, обеспечивающих радиальную фокусировку. Это объясняется тем, что при величине синхронной фазы около 90° темп ускорения пропорциональный $\cos\varphi_s$ является низким. Поэтому в фокусирующих периодах для увеличения среднего темпа ускорения необходимо выбирать минимально возможные значения φ_s , так как при этом уменьшается жесткость фокусировки пучка, которая пропорциональна $\sin\varphi_s$.

ПАРАМЕТРЫ И КОНСТРУКЦИЯ НЕКОТОРЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ

Первый малогабаритный ускоритель дейтронов на энергию $4.8 \cdot 10^{-13}$ Дж (3,0 МэВ) с использованием H -резонатора, в котором устойчивость пучка в процессе ускорения обеспечивалась методом МПФФ, был создан в ННЦ ХФТИ в 1976 году на базе ускорителя МЛУД-3. Напряженность поля на оси в зазорах составляла $80 \cdot 10^5$ В/м, величина тока пучка – $150 \cdot 10^{-3}$ А в импульсе и была ограничена малым током инжекции.

Ускоритель был основательно переработан в 1985 году с учетом накопленного опыта расчетных, научно-исследовательских и проектно-конструкторских работ [32]. Длина ускоряющей структуры осталась прежней (около 1,3 м), а ускоряющее поле на оси было увеличено до $120 \cdot 10^5$ В/м. Общая площадь ускорителя со всеми вспомогательными системами не превышала 35 м^2 .

Ускоряющая структура, также как и в первом варианте, представляла собой H -резонатор с креплением трубок дрейфа на гребенках с π -периодичностью ускоряющего поля.

Геометрия гребенок ускоряющего тракта, имеющая сложную конфигурацию, была определена экспериментальным моделированием электродинамических характеристик, при помощи специально созданного автоматизированного измерительного комплекса [35], с последующей настройкой распределения высокочастотного поля в резонаторе. Численный расчет геометрии ускоряюще-фокусирующего канала с МПФФ и детальный анализ устойчивости движения частиц в канале показали, что оптимальным параметрам соответствует ускоряющий канал, содержащий 16 периодов ускорения, сгруппированных в четыре периода фокусировки. Три первых периода фокусировки, включающих ускоряющие периоды с одной отрицательной и двумя положительными синхронными фазами, определяли фазовую и радиальную устойчивость, а четвертый – с четырьмя отрицательными и тремя положительными синхронными фазами обеспечивал расчетные параметры пучка на выходе структуры. Ускоритель позволял получать дейтроны с энергией $5,12 \cdot 10^{-13}$ Дж (3,2 МэВ) при токе в импульсе $70 \cdot 10^{-3}$ А.

Увеличение тока пучков, улучшение их характеристик, расширение диапазона энергий ускоренных частиц, создает возможности для более широкого использования линейных ускорителей протонов и дейтронов, однако связано с дополнительными проблемами при их разработке. Повышение энергии ускоренных частиц требует предельных значений напряженности электрического поля и сопряжено с удлинением ускоряющего тракта. Высокие значения напряженности ускоряющего поля повышают не только темп ускорения, но и вероятность электрического пробоя промежутков, снижая надежность работы ускорителя. В длинном тракте нельзя обеспечить достаточно высокий темп ускорения, без уменьшения жесткости радиальной фокусировки. Кроме того, нелинейность компонент электрического поля в ускоряющих зазорах, скачкообразные изменения величины и знака синхронной фазы и связанное с этим слабое затухание продольных фазовых колебаний приводят к заметному росту эффективного эмиттанса пучка и, как следствие, к росту линейных потерь ионов. С повышением потерь значительно усложняются радиационные проблемы эксплуатации ускорителей. Обычные относительные потери частиц в процессе ускорения приводят к радиационному повреждению материалов элементов конструкций, возрастанию интенсивности вторичных излучений, уменьшению электрической прочности ускоряющих промежутков из-за распыления и радиационной эмиссии материалов, возрастанию наведенной активности [36]. Важнейшей задачей при разработке технологического линейного ускорителя ионов является снижение уровня потерь частиц в его канале и, соответственно, уровня активации элементов конструкции, до значений, при которых возможно безопасное обслуживание оборудования и систем. Таким образом, радиационная чистота высокоэнергетического линейного ускорителя определяется жесткостью фокусировки и обеспечением устойчивой динамики пучков ионов в ускоряющих секциях по мере роста энергии заряженных частиц.

Один из возможных путей решения проблемы – комбинирование МПФФ с фокусировкой магнитными полями [37-40]. Например, ускоряюще-фокусирующий канал ускорителя дейтронов для комплекса нейтронного активационного анализа элементного состава материалов на энергию $4.8 \cdot 10^{-13}$ Дж (3 МэВ) и током пучка в импульсе $50 \cdot 10^{-3}$ А состоял из двух резонансных ускоряющих секций и расположенного между ними фокусирующего магнитного квадрупольного триплета. Резонаторы ускоряющих секций размещались в отдельных вакуумных объемах. В первом резонаторе трубки дрейфа располагались на двух парах сплошных держателей и образовывали 22 ускоряющих периода. Вторая секция включала 13 ускоряющих периодов, которые формировали три неполных периода фокусировки. Трубки дрейфа этой секции располагались на одной паре гребенчатых держателей. Такое разбиение ускоряющего канала на отдельные секции не только упрощает

технологии изготовления гребенчатых держателей и настройку резонаторов, но и позволяет получить оптимальное распределение напряжённости электрического поля вдоль оси системы, по мере роста величины ускоряющих зазоров, без существенного снижения электродинамических характеристик и электрической прочности канала. Между ускоряющими секциями размещался магнитный квадрупольный триплет для формирования пучка с фазовыми характеристиками, необходимыми для согласования с аксептансом и сепаратриссой последующей секции. Структура обеспечивала ускорение пучка до выходной энергии практически без потерь.

Конструкция линейного дейтронного ускорителя непрерывного действия на энергию $36,8 \cdot 10^{-13}$ Дж (23 МэВ) с током $3 \cdot 10^{-3}$ А [38] определялась параметрами имеющихся в наличии генераторов ВЧ - питания. Ускоряющий канал был разбит на девять отдельных секций, а напряженность электрического поля в ускоряющих зазорах не превышала $45 \cdot 10^5$ В/м. Ускоряющее-фокусирующий канал рассчитывался таким образом, чтобы минимизировать потери дейтронов, особенно в последних секциях, с учетом снижения жесткости динамики пучка с уменьшением напряженности поля. Согласование продольных фазовых характеристик на переходах между секциями осуществлялось путем выбора длины участка дрейфа и формированием на выходе секций сгустков, сходящихся в продольном направлении. Для этого последние ускоряющие периоды каждой секции строились фазирующими. Дефокусирующее действие последних зазоров компенсировалось магнитными триплетами. Такой подход при моделировании динамики пучка позволил упростить построение ускоряющего канала и существенно уменьшить потери частиц в последних высокоэнергетических секциях.

Перспективная концепция обеспечения устойчивости движения частиц в линейных резонансных ускорителях легких ионов основанная на комбинации переменного-фазовой фокусировки и фокусировки продольным магнитным полем [39,40]. Методом математического моделирования исследован вариант канала для ускорения протонов от $0,144 \cdot 10^{-13}$ Дж (90 кэВ) до $137,6 \cdot 10^{-13}$ Дж (86 МэВ) с током на уровне $35 \cdot 10^{-3}$ А. Ускоряющая секция представляла собой объемный цилиндрический резонатор, нагруженный трубками дрейфа. Трубки дрейфа из ферромагнитного материала с высокой индукцией насыщения заключены в медную оболочку, толщиной более величины скин-слоя на рабочей частоте ускорителя. Магнитное поле в ускоряющем канале, на участках между трубками дрейфа, создается внешней по отношению к резонатору магнитной цепью. Она включает ферромагнитные сердечники и торцевые магнитопроводы. Соленоиды, расположенные на ферромагнитных сердечниках служат для создания магнитодвижущей силы. Суммарный поток магнитной индукции, создаваемый соленоидами, замыкается по участку внутренней магнитной цепи, образованной последовательностью трубок дрейфа и зазоров между ними. Таким образом, вакуумное магнитное поле концентрируется на участках между трубками дрейфа, образуя цепочку коротких, аксиально-симметричных магнитных линз, создающих дополнительный к ППФ фокусирующий эффект.

Оценки показывают, что при наличии магнитного поля средний ток на входе последней секции можно увеличить до $40 \cdot 10^{-3}$ А и при этом критерий радиационной чистоты канала не будет превышен, тогда как при выключенном магнитном поле последней секции потери частиц превышают уже при токе $0,2 \cdot 10^{-3}$ А на входе этой секции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение H – резонаторов в сочетании с обеспечением устойчивости динамики движения пучков методом модифицированной переменного – фазовой фокусировки позволяет создавать высокоточные малогабаритные линейные ускорители различного назначения в широком диапазоне энергий ускоренных частиц, наиболее полно удовлетворяющие требованиям к ускорителям прикладного назначения. Метод МППФ достаточно универсален и дает возможность разрабатывать эффективные ускоряющие структуры не только на его основе, но и в комбинации с другими методами, например с фокусировкой магнитным полем. Опыт, полученный в процессе разработки H -резонаторов с МППФ, дает надежду на расширение диапазона исследований ускорителей такого типа в область энергий ускоренного пучка до $1,6 \cdot 10^{-11}$ Дж (100 МэВ) и выше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rjabuhin Ju.S., Shal'nov A.V. Uskorennye puchki i ih primeneniye. – М.: Atomizdat, 1980. – 182 s.
2. Sbornik dokladov Desjatogo mezhdunarodnogo soveshhanija po primeneniju uskoritelej zarjzhennyh chastic v promyshlennosti i medicine / CNIIatominform. – Moskva, 2001. – 440 s.
3. Murin B.P., Bondarev B.I., Kushin V.V., Fedotov A.P. Linejnye uskoriteli ionov. T.1.– М.: Atomizdat, 1978.– 264 s.
4. Murin B.P., Kul'man V.G., Lomize L.G., Poljakov B.I., Fedotov A.P. Linejnye uskoriteli ionov. T.2.– М.: Atomizdat, 1978. – 320 s.
5. Blewett J.P. Linear accelerator injector for proton synchrotron // Symposium on High Energy Accelerators / CERN, Geneva, 1956. – P.159 166.
6. Pottier J. Une nouvelle structure a cavite resonante pour accselelateurs lineaires dions // Note C.E.A. No. 195 / C.E.A.– Cedex France, 1957. – 9 p.
7. Zejdlic P.M., Jamnickij V.A. Issledovanie uskorjajushhih sistem, rabotajushhih na volnah, analogichnyh N // Atomnaja energija. – 1961. – T. 10. – Vyp. 5. – S. 469 - 477.

8. Bomko V.A., Revuckij E.I., Bolotin L.I. Issledovanie uskorjajushhej struktury na N111 volne // ZhTF. – 1964. – T.34. – Vyp.7. – S. 1259–1265.
9. Kovpak N.E., Baranov L.N., Zejdlic P.M. Linejnyj uskoritel' protonov na energiju 2,5 MeV // UFZh. – 1968. – T.13. – Vyp. 4. S. 553–566.
10. Kovpak N.E., Papkovich V.G., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. Issledovanie dispersionnyh karakteristik nagruzhennyh rezonatorov, vzbuzhdaemyh volnami tipa N // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Fizika vysokih energij i atomnogo jadra. – 1975. – Vyp.- 1(13). – S. 29–34
11. Baranov L.N., Bryzgalov G.A., Kovpak N.E., Papkovich V.G., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. Issledovanie raspredelenija naprijazhennosti jelektricheskogo polja na osi nagruzhennyh N - rezonatorov // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Fizika vysokih energij i atomnogo jadra. - 1975. – Vyp. 1(13). – S. 35–39.
12. Baranov L.N., Bryzgalov G.A., Verbovskij V.V., Kovpak N.E., Onoprienko V.T., Papkovich V.G., Hizhnjak N.A., Shulika N.G., Jashin V.P. Malogabaritnyj linejnyj uskoritel' dejtonov na energiju 3 MeV // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Fizika vysokih energij i atomnogo jadra. - 1975. – Vyp. 1(13). – S. 15–17.
13. Baranov L.N., Bryzgalov G.A., Verbovskij V.V., Kovpak N.E., Onoprienko V.T., Papkovich V.G., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. Issledovanie malogabaritnogo linejnogo uskoritelja dejtonov na energiju 3 MeV // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Fizika vysokih energij i atomnogo jadra. – 1975. - Vyp.1(13). – S. 18–21
14. Bondarenko Ju.I., Medvedev A.B., Rudenko V.S. Ispol'zovanie dejtronov s energiej 3 MeV v aktivacionnom analize // Atomnaja energija. – 1981. – T. 52. – Vyp. 3. – S. 189–190.
15. Good M.L. Phase-Reversal focusing in Linear Accelerators // Phys.Rev. – 1953. – Vol.92. – No. 2. – P. 538–545.
16. Fajnberg Ja.B. Peremennno-fazovaja fokusirovka v linejnyh uskoriteljah // ZhTF. – 1959. – T. 29. – Vyp. 5. – S. 568–573.
17. Kapchinskij I.M. Teorija linejnyh rezonansnyh uskoritelej. – M.: Energoizdat, 1982. – 310 s.
18. Kushin V.V., Zarubin B.T., Svirin V.V., Chistjakova N.M. Linejnyj uskoritel' protonov na energiju 550 keV s asimmetrichnoj fazoperemennoj fokusirovkoj // PTE. – 1972. – No. 6. – S. 15–17.
19. Ukaz Prezidenta Ukraïni vid 11 grudnja 1996 r No.1190 Pro prisudzhennja Derzhavnih premij Ukrayini v galuzi nauki i tehniki 1996 roku Gazeta: Urjadovij Kurier. zasnovnik «Kabinet Ministriv Ukrayini». – No. 243(938). – 26 grudnja 1996 r.
20. Papkovich V.G., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. Peremennno - fazovaja fokusirovka v linejnyh uskoriteljah // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Tehnika fizicheskogo eksperimenta. – 1978. – No. 2(2). – S. 51–56.
21. Malyshev Je.N., Azovskaja Z.A., Papkovich V.G., Belej A.S., Skoromnyj G.M., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. O vozmozhnosti primenenija modifirovannoj peremennno-fazovoj fokusirovki v uskoriteljah mnogozarjadnyh ionov pri malyh energijah // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Tehnika fizicheskogo eksperimenta. – 1983. – Vyp. 3(15). – S. 20–24.
22. Belej A.S., Gonchar V.Ju., Kaplin S.S., Sapelkin S.A., Hizhnjak N.A., Shestopal S.A., Shulika N.G. Chislennoe modelirovanie dinamiki chastic v uskoritele protonov na 3 MeV s peremennno - fazovoj fokusirovkoj (PFF) // Preprint HFTI AN USSR. -1980. - HFTI 80 29. – 27 S.
23. Horuzhij V.M., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. K teorii modifirovannoj peremennno-fazovoj fokusirovki // UFZh. - 1983. – T. 28. - S. 1668–1674.
24. Gusev E.V., Hizhnjak N.A. Issledovanie peremennno – fazovoj fokusirovki v linejnyh protonnyh uskoriteljah // Trudy 14 soveshhanija po uskoriteljam zarjazhennyh chastic. – T. 3. Protvino. – 1994. – S. 33–43.
25. Belej A.S., Kabanov V.S., Shulika N.G. i dr. O predele toka v uskoritele s peremennno-fazovoj fokusirovkoj // AE. – 1980. – T. 49. – Vyp. 5. – S. 294–295.
26. Belej A.S., Kaplin S.S., Hizhnjak N.A., Shestopal S.A., Shulika N.G. O nekotoryh osobennostjah peremennno - fazovoj fokusirovki // UFZh. – 1982. – T. 27. – S. 1132–1136.
27. Hizhnjak N.A. Linejnye uskoriteli tjazhelyh zarjazhennyh chastic HFTI AN USSR // UFZh. – 1978. – T. 23. - No. 11. – S. 1853–1865.
28. Karetnikov D.V., Slivkov I.N., Tepljakov V.A., Fedotov A.P., Shembel' B.K. Linejnye uskoriteli ionov. – M.: Gosatomizdat. - 1962. – 208 s.
29. Val'dner O.A., Vlasov A.D., Shal'nov A.V. Linejnye uskoriteli. – M.: Atomizdat. – 1969. – 248 s.
30. Gonchar V.Ju., Kaplin S.S., Sapelkin S.A., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. Modelirovanie na EVM dinamiki chastic v linejnom uskoritele s peremennno-fazovoj fokusirovkoj // UFZh. – 1979. – T. 24. - No. 11. – S. 1705–1709.
31. Kaplin S.S., Hizhnjak N.A., Shulika N.G. i dr. O vozmozhnosti ispol'zovanija bystrodejstvujushhijh EVM dlja rascheta uskorjajushhijh traktov s peremennno - fazovoj fokusirovkoj // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Tehnika fizicheskogo eksperimenta. – 1980. - Vyp. 2 (6). - S. 18–20
32. Belej A.S., Gusev E.V., Derepovskij V.N., Kaplin C.S., Krivulja S.Ju., Shestopal S.A., Shulika N.G. Proekt rekonstrukcii uskorjajushhej struktury malo gabaritnogo linejnogo uskoritelja dejtronov // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Tehnika fizicheskogo eksperimenta. – 1987. - Vyp. 4 (35). – S. 8–10.
33. Voronko V.A., Gusev E.V., Demchenko P.A., Sotnikov V.V., Shulika N.G., Shulika O.N. Chislennoe modelirovanie dinamiki chastic v kanale linejnogo rezonansnogo uskoritelja dejtronov na energiju 23 MeV // Problems of Atomic Science and Technology. - Series: Nuclear Physics Investigations. - 2008. - No. 3 (49). – S. 86–90.
34. Vdovin S.A., Gusev E.V., Demchenko P.A., Shulika O.N., Shulika N.G. Chislennoe modelirovanie dinamiki chastic v kanale linejnogo rezonansnogo uskoritelja dejtronov na energiju 3 MeV // Tezisy dokladov HHI Mezhdunarodnogo seminaru po uskoriteljam zarjazhennyh chastic / HFTI, Har'kov, 2009. – S. 85–86.
35. Gusev E.V., Demchenko P.A., Shulika N.G. Eksperimental'noe testirovanie chislennoe modelirovanija elektricheskijh polej v uskorjajushhej struktury // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear Physics Investigations. – 2010. - No. 3 (54). – S. 67–71.
36. Hizhnjak N.A., Shiljaev B.A., Shulika N.G. Radiacionnye i materialovedcheskie problemy linejnyh uskoritelej zarjazhennyh chastic // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Tehnika fizicheskogo eksperimenta. – 1988. – No. 2(37). – S. 11–15.

37. Vdovin S.A., Gusev E.V., Demchenko P.A., Shulika N.G. Linejnyj uskoritel' dejtronov dlja elementnogo analiza // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear Physics Investigations . – 2010. - No. 2 (53). – S. 29-33.
38. Voronko V.A., Gusev E.V., Demchenko P.A., Lymar' A.G., Sotnikov V.V., Shulika N.G., Shulika O.N. Linejnyj dejtronnyj uskoritel' nepreryvnogo dejstvija // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear Physics Investigations. – 2008. - No. 5 (50). – S. 28-32.
39. Vdovin S.A., Demchenko P.A., Gusev E.V., Shulika N.G., Shulika O.N. Kombinirovannaja fokusirovka v linejnom uskoritele ionov // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Electronics and New Methods of Acceleration. – 2010. - No. 4 (68). – S. 325-329.
40. Vdovin S.A., Gusev E.V., Demchenko P.A., Shulika O.N., Shulika N.G. Uskorjajushhaja sistema tehnologicheskogo linejnogo uskoritelja dejtronov // Tezisy dokladov HHII Mezhdunarodnogo seminaru po uskoriteljam zarjzhennyh chastic/ HFTI, Har'kov, 2011. – S. 93.

PACS: 44.25.+f, 47.20.Bp

DESTRUCTION OF BERNARD CELLS UNDER LOCAL IRREGULARITIES OF THERMAL EQUILIBRIUM AND THEIR FORMING OVER THE BERNARD CELLS

L.S. Bozbiei^{1,3)}, A.O. Kostikov^{2,3)}, V.I. Tkachenko^{1,2)}

¹⁾ «Kharkov Institute of Physics and Technology» NAS of Ukraine

Akademicheskaya str. 1, 61108, Kharkov, Ukraine

²⁾ V.N. Karazin Kharkiv National University

Svobody sq. 4, 61022, Kharkov, Ukraine

³⁾ «A.N. Podgorny Institute for Mechanical Engineering Problems» of NAS of Ukraine

Pozharsky str. 2/10, 61046, Kharkov, Ukraine

E-mail: tkachenko@kipt.kharkov.ua

Received April 30, 2015

Results of the experiments on destruction of Bernard cells are described. Destruction of BC was conducted by two ways: micro-drop of the cooled vacuum oil, dropped on the surface of the formed Bernard cells and local change of temperature of the upper border of the layer with heated copper wire. It was offered to study the destruction of convective Bernard cells on the Sun (super-granules) as the result of quick heating of their lower border. Mathematical description of the destruction mechanism is presented. Method of calculation of volume expansion of the solar matter is presented. Value of coefficient of volume expansion was obtained which allowed decreasing the Rayleigh number of the super-granule to the value of free cell. It was shown that increase on the order of the temperature of lower boundary of the super-granule, results in the increase of Rayleigh number and as a sequence in acceleration of the solar matter. Acceleration time of the solar matter to the second orbital velocity was estimated. It constitutes 3-10 s, and time of solar matter outburst (eruptive flare) is about $2.23 \cdot 10^3$ s. Distance of solar matter outburst is about $7 \cdot 10^8$ m and comparable with the Sun radius. Experimental results on forming the air Bernard cells over the oil Bernard cells is described and numerically analyzed. Correspondence of sizes of air Bernard cells to ones of oil Bernard cells is explained.

KEYWORDS: elementary convective cell, convective processes, transfer of heat, temperature gradient, velocity of mass transfer

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ ЯЧЕЕК БЕНАРА ПРИ ЛОКАЛЬНЫХ НАРУШЕНИЯХ ТЕПЛООВОГО РАВНОВЕСИЯ

Л.С. Бозбей^{1,3)}, А.О. Костиков^{2,3)}, В.И. Ткаченко^{1,2)}

¹⁾ «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины

ул. Академическая, 1, 61108, г. Харьков, Украина

²⁾ Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

пл. Свободы, 4, 61022, г. Харьков, Украина

³⁾ «Институт проблем машиностроения имени А.Н. Подгорного» НАН Украины

ул. Пожарского, 2/10, 61046, г. Харьков, Украина

В работе описаны результаты экспериментального исследования разрушения ячеек Бенара. Разрушения ячеек Бенара проводились двумя способами: добавлением микрокапли более холодного вакуумного масла на поверхность ячеек и локальное изменение температуры верхней границы слоя разогретым медным шупом. Было предложено изучение разрушение конвективных ячеек Бенара на Солнце (супергранул) в результате быстрого нагрева их нижней границы. Представлены математическое описание механизма разрушения и метод расчета объемного расширения солнечного вещества. Значение коэффициента объемного расширения получено, что позволило уменьшить число Рэлея супергранулы до значения свободной ячейки. Было показано, что увеличение порядка температуры нижней границы супергранулы, приводит к увеличению числа Рэлея и, как следствие, к ускорению солнечного вещества. Было оценено время ускорения солнечного вещества, оно составляет 3-10 с, а время выброса солнечного вещества (эруптивной вспышки) составляет около $2.23 \cdot 10^3$ с. Размер вспышки солнечной материи около $7 \cdot 10^8$ м и он сопоставим с радиусом Солнца. Экспериментальные результаты формирования воздушных ячеек Бенара над масляными ячейками Бенара описаны и численно проанализированы. Объяснено соответствие размеров ячеек Бенара в воздухе и масле.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: элементарная конвективная ячейка, конвективные процессы, перенос тепла, температурный градиент, скорость массопереноса

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ РУЙНУВАННЯ КОМІРОК БЕНАРА ПРИ ЛОКАЛЬНИХ ПОРУШЕННЯХ ТЕПЛОВОЇ РІВНОВАГИ

Л.С. Бозбей^{1,3)}, А.О. Костиков^{2,3)}, В.І. Ткаченко^{1,2)}

¹⁾ «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України

вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків, Україна

²⁾ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

майдан Свободи, 4, 61022, м. Харків, Україна

³⁾ «Інститут проблем машинобудування імені А.М. Підгорного» НАН України,

вул. Пожарського, 2/10, 61046, м. Харків, Україна

У роботі наведені результати експериментального дослідження руйнування комірок Бенара. Руйнування комірок Бенара виконувалось двома методами: додаванням мікрокраплі найбільш холодної вакуумної оливи на поверхню комірок та

локальна зміна температури верхньої границі слою розігрітим мідним щупом. Було запропоновано вивчити руйнування конвективних комірок Бенара на Сонці (супергранул) шляхом швидкого нагріву їх нижньої границі. Наведено математичний опис механізму руйнування та методу розрахунку об'ємного розширення сонячної речовини. Отримано значення коефіцієнту об'ємного розширення, що дозволило зменшити число Релея супергранули до значення вільної комірки. Було показано, що збільшення порядку температури нижньої границі супергранули призводить до збільшення числа Релея та, як результат, до прискорення сонячної речовини. Оцінено час прискорення сонячної речовини, він складає $3 \cdot 10^8$ с, а час виносу сонячної речовини (еруптивного спалаху) складає майже $2.23 \cdot 10^3$ с. Розмір спалаху сонячної матерії $7 \cdot 10^8$ м та він порівняний із радіусом Сонця. Експериментальні результати формування комірок Бенара у повітрі та в оливі описані та чисельно проаналізовані. Пояснена відповідність розмірів комірок Бенара у повітрі та маслі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: елементарна конвективна комірка, конвективні процеси, перенесення тепла, температурний градієнт, швидкість масопереносу

CONCERNING THE FORMATION AND DESTRUCTION OF CONVECTIVE CELLS. TASK DEFINITION

Phenomenon of self-organization under heat convection in the layer of viscous fluid, heated from below, that was discovered by Claude Bernard (1874–1939), French physicist, has been of interest for researches for more than a century [1]. The reason of the interest lies in the striking universality of the discovered phenomenon. It is used in different technological processes, very often can be observed in every day life. There are also hypotheses that explain some phenomena on the Sun and in Earth atmosphere, with the theory of Bernard cells. In all such cases, researches, as a rule, pay attention on the formed spatially periodic structure of surfaces of different configuration: from the strips to densely pave with polygons (not necessary accurate), reflecting its convective flow between the layer borders. However till present time, the problem of existence of convective cells (basic cells) from which the Bernard cell systems are formed, remained without attention.

As the experiments show [2], spatially periodic structures do not appear instantly, but there is a time interval, during which the number of separated cylindrical convective cells is growing. Finally, they fill the whole volume of liquid, creating for example the Bernard cells. Papers [2, 3] offer description of elementary convective cell, from a large number of which the spatially periodic stable in time structures appear.

Due to forming of such spatially periodic structures, the appropriate interest appears in research of their influence on the media with restrict them from above. This media can be either liquid or gaseous. Experiments on simulation of forming the convective cells in the layer of silicone oil with free boundaries, placed over the mercury layer and limited from above with helium layer, is mentioned in [4]. These experiments do not mention forming of convective cells in helium over the cells in oil, although observations of lower boundary of the clouds [5], and also boundaries oil-air [2] indicate on formation of Bernard cells in the boundary mediums. That is why research of origination of convective cells formed with Bernard cells is relevant for determination of conditions and physical principals of their origination.

Together with phenomenon of forming the time stable spatially periodic structures, processes of their destruction remain unstudied. Example of such destruction is probably the outburst of prominences from the Sun convective area. That is why determination of conditions and mechanisms of destruction of convective cells is also the actual problem.

Questions concerning the formation and destruction of convective structures demand experimental research and theoretical analyses for explanation of nature of such phenomena.

Purpose of this paper is the experimental research of destruction of convective cells for different mechanisms of destruction of thermal equilibrium including the processes of destruction of convective cells on the Sun and also research of processes of forming the Bernard cells by other Bernard cells.

DESCRIPTION OF EXPERIMENTS ON FORMING THE CONVECTIVE CELLS IN CYLINDRICAL TANKS WITH OIL

Experiments on forming the convective cells were carried out with usage of vacuum oil BM-5 (2 ml), in which small quantity of aluminum powder (0.056 g) was added for visualization of oil movement.

Conditions of carrying out experiments were as follows:

Oil with layer thickness about 1 mm was poured into cylindrical tank with radius 26 mm and height 2.5 mm. Heating of the tank was carried out from below with electrical furnace. Oil temperature on the tank bottom could raise to the level of 220 °C. Kinematic viscosity of the vacuum oil under mentioned temperatures was estimated with value $10 \text{ mm}^2/\text{s}$ [6].

Experiments were carried out in two stages.

At the first stage conditions of origin of long-lived convective cells in the form of densely packed polygons including hexagons were determined. Within the experiments it was shown that when the temperature of the tank bottom reaches $120 \pm 1\%$ °C the convective cells appeared with diameter 3.2 mm [2, 3].

At the second stage on the upper boundary of oil, we created conditions, which resulted in quick (in comparison with the time of convective cells existence) change of its temperature. These conditions had been created by two ways. The first one consisted in dropping the cold micro-drops on the oil surface. The second one consisted in bringing the copper wire, which was heated to the temperature of the tank bottom, to the center of one of the convective cells.

DESTRUCTION OF CONVECTIVE CELLS DUE TO THE COOLING OF THE UPPER BOUNDARY, CAUSED BY ADDING THE MICRO-DROP OF THE COLDER OIL

Micro-drop of vacuum oil without adding the aluminum powder with temperature 17 °C was dropped on the upper boundary of convective cells from 1 ml syringe with needle 0.4×13. Due to great difference of temperatures of the upper oil layer and the micro-drop, Leidenfrost effect was observed [7]: when the micro-drop liquid in contact with much more hot oil creates the isolation layer of vapor, which prevents the micro-drop liquid from quick boiling-off.

As a result of this, the micro-drop moves for some time over the surface of oil on the vapor blanket, created on its lower boundary. Then, the micro-drop temperature increases, micro-drop is destroyed and spreads over the oil surface, thus decreasing the temperature of this surface. Processes described above are presented on Fig. 1a,b,c.

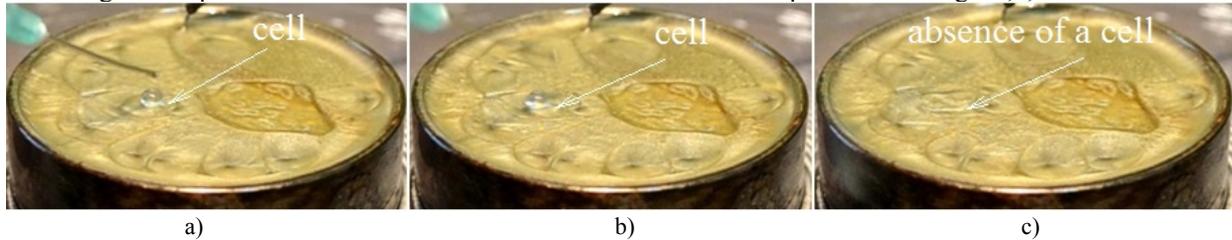


Fig. 1. Destruction of convective cells in vacuum oil by micro-drop of the cooled vacuum oil.

Fig. 1a shows initial position of vacuum-oil micro-drop after its dropping on the oil surface. It is seen on the figure, that at first the micro-drop is placed to the right from the center of the convective cell. Then due to Leidenfrost effect it moves a little to the right (Fig. 1b) from the cell center. After spreading of micro-drop of colder oil over the cell surface (Fig. 1c) its destruction is observed. According to our estimates destruction of cell is stipulated with the decrease of temperature of the upper boundary of the convective cell: the decrease of temperature increases Rayleigh number and transfers the eigenvalue λ of the boundary problem from the zero value, corresponding to stationary condition [3], to the area of negative numbers under which the equilibrium is distorted and convective cells are destroying.

It should be noted that burst of micro-drop of the hot oil on convective cell does not result in Leidenfrost effect and its destruction.

Thus, it is experimentally shown that decrease of temperature of the upper boundary of convective cell, which is caused by dropping the cold oil drop on its surface, results in destruction of convective cell.

DESTRUCTION OF CONVECTIVE CELLS UNDER CONTACTLESS HEATING OF THE UPPER OIL BOUNDARY WITH COPPER WIRE

The upper boundary of the selected convective cell was contactless influenced with thin heated copper wire with diameter 1 mm, not destroying convective flux in the cell. Start and completion of the process of wire influence on the cell is presented on Fig. 2 a) and b) correspondingly. From the presented pictures it follows that at the beginning of the process the cells was stable and had accurately outlined boundaries. After approaching to the center of convective cell with the heated copper wire with diameter 1 mm destruction of cell took place within 1–2 s, which lied in disappearance of its border and destruction of convective flux. Then, during the some period of time, convective cell of the same type appeared on the place of disappeared cell.

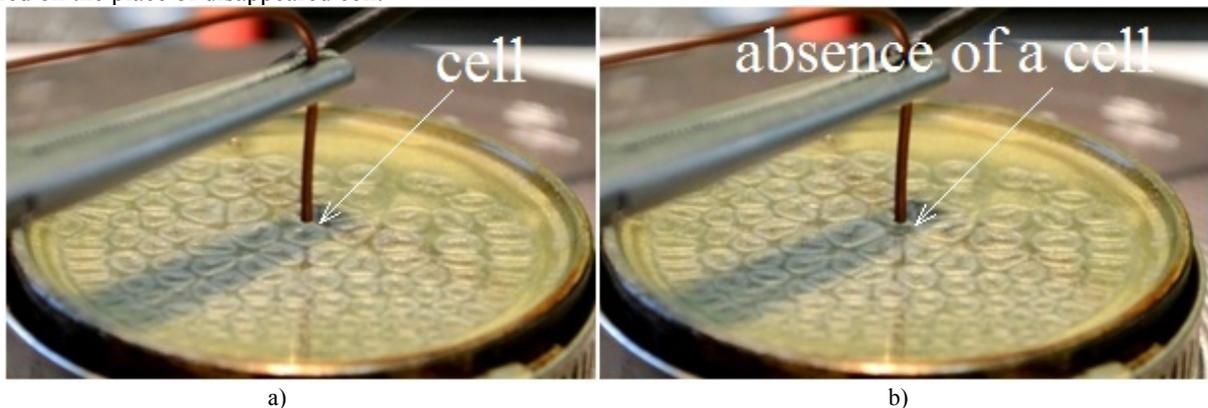


Fig. 2. Destruction of convective cells in vacuum oil by copper wire.

Fig. 2 a) shows convective cell at a moment after approaching the heated copper wire. Fig 2 b) corresponds to the moment with 3–5 s after approaching the wire. As we can see from Fig. 2b), the convective cell destructed due to influence with the heated copper wire.

Based on the experiment carried out it can be concluded, that decrease of temperature of the upper boundary of the convective cell in vacuum oil as a result of influence with heated copper wire results in cell destruction.

DESTRUCTION OF CONVECTIVE CELLS ON THE SUN AS A RESULT OF QUICK HEATING OF THEIR LOWER BOUNDARY

It is known that in convective area of the Sun, with length 2×10^5 km, convective cells of different sizes are observed. Due to flares on the Sun, special attention, is paid to super-granules, placed in the lower layers of convective zone with characteristic sizes: diameter of $(2 - 4) \times 10^4$ km, thickness of $(3 - 8) \times 10^3$ km [7, 8]. Life-time of the super-granules constitutes the value about $\tau_v \approx 20 - 36$ hours. Movement of the solar matter corresponds to the movement in l cells [11], that is in the center of the cell matter moves from the Sun center.

Due to this it is interesting to study the flares on the Sun [12; 13], as the studied above result of quick change of temperature of the lower boundary of convective cells (supergranules). Fig. 3 shows pictures of separate moments of powerful solar flare, obtained by step-by-step image scanning of video of the solar flare, registered by American space agency (NASA) 01.09.2014 [13].

According to [13], statistic analyses of data on the soft X-rays of the Sun determines three types of flares: quick flares with duration not more than 30 min; typical two-ribbon flares with duration to 1-2 hours; rare long duration events (LDE). LDE consist of flares with complicated space-time structure. At this one or several flare peaks can form post-eruptive flares in the form of arcs. Raise of the arc system, as a rule, is finished on the height from 3×10^4 to 10^5 km, but in rare cases it parts goes into interplanetary space.

Fig. 3 shows that flare is finished on the heights about the Sun diameter and belong to the type when arc systems go into interplanetary space. Presented fragments of the flare confirm, that, evidently, it is formed by several connected super-granules. Conclusion on participation of several super-granules in the flare is made from the following visual facts:

1. Area of several active spots on the Sun disk, which does not result in ejection of matter, are formed from several supergranules;
2. Presence of ruled flash in the basis of solar flare confirm that each such line correspond to matter ejection from the center of super-granules participating in the flare.
3. Estimation of the diameter of the base of solar flare, carried out with use of Fig. 3 provides the value in the range from 6×10^4 to 12×10^4 km, that is several time greater than diameter of a super-granule.

The video of the solar flare dated 01.09.2014 [13] shows that tail part of the ejected matter returns on the Sun surface under gravity force and head part goes into interplanetary space. Most likely this can be explained by the fact that head part of the solar flare in the process of development of instability in the super-granule obtains second orbital velocity (617.7 km/s) and can overcome the Sun gravity.

Below we give the estimations confirming the possibility of development of the instability in the separate supergranule in the result of lower boundary temperature growth.

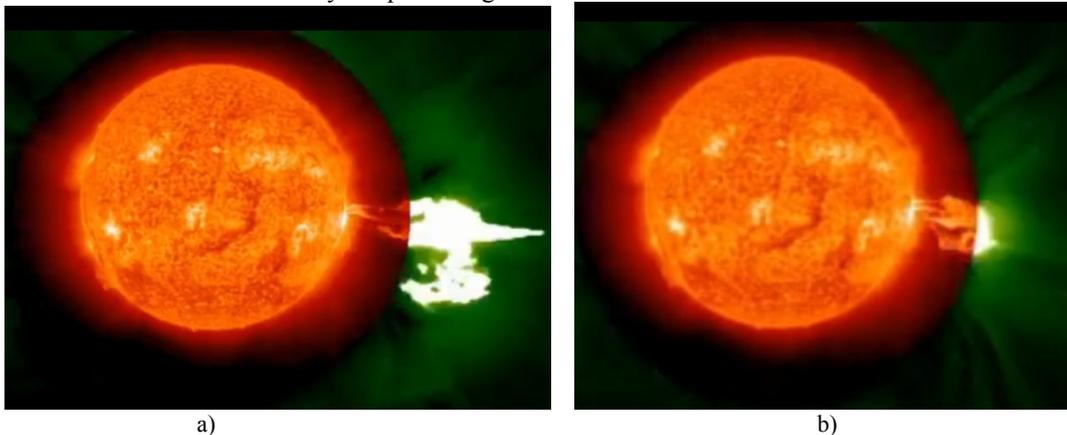


Fig. 3. Separate moments of the powerful solar flare registered by NASA 01.09.2014
(a) the head part of powerful solar flare goes to interplanetary space, (b) the tail part of ejected matter flashes are coming back to the surface of the Sun by gravity.

Let's describe velocity, lifetime and distance of solar flare outburst based on the analyses of processes in the composing super-granules. For this present distribution of velocities in the separate super-granule with expression describing distribution of velocities in the elementary convective cell with free boundary conditions for mode number $n = 1$ [2, 3]:

$$v_z(r, z, t) = A \sin(\pi z) J_0(k_{r,1} r) \exp(-\lambda_{1,1}^- (Ra) t), \quad (1)$$

$$v_r(r, z, t) = -A \pi k_{r,1}^{-1} \cos(\pi z) J_1(k_{r,1} r) \exp(-\lambda_{1,1}^- (Ra) t), \quad (2)$$

where $\lambda_{n,1}^-(Ra) = \frac{P+1}{2P}(\pi^2 + k_{r,1}^2) - \left(\left(\frac{P-1}{2P} \right)^2 (\pi^2 + k_{r,1}^2)^2 + \frac{Ra \cdot k_{r,1}^2}{P(\pi^2 + k_{r,1}^2)} \right)^{\frac{1}{2}}$ – eigenvalues, characterizing the decrease ($\lambda_{n,1}^- > 0$), increase ($\lambda_{n,1}^- < 0$) or steady state ($\lambda_{n,1}^- = 0$) of the perturbed velocities, $Ra = g_{Sun} \beta h^3 \Theta / (\nu \chi)$ – Rayleigh number, h – cell thickness, g_{Sun} – acceleration of gravity on the Sun, $P = \nu / \chi$ – Prandtl number, ν и χ – coefficients of kinematic viscosity and thermal diffusivity correspondingly, β – coefficient of volume temperature expansion of the matter, $J_l(x)$ – Bessel functions of the first kind of the l -order; $k_{r,1} = \sigma_{1,1} R_c^{-1}$ – radial wave number, characterizing dependence of perturbations from the transverse dimensionless coordinate r , z – vertical dimensionless coordinate (origin of coordinates is placed at the center of bottom face of super-granule), $\sigma_{1,1}$ – 1st zero of the Bessel function of the first type of the first order ($J_1(\sigma_{1,1}) = 0$), R_c - dimensionless radius of the convective cell.

Quiet phase of the Sun. In steady state $\lambda_{n,1}^- = 0$. According to [10, 17], in steady state, the Rayleigh number for super-granule is equal to $R_s = 2 \cdot 10^7 \div 2 \cdot 10^{11}$, which significantly exceeds the minimal critical Rayleigh number for free convection– [15, 18] $R_m = \frac{27}{4} \pi^4 \approx 657,511$. That is why it is necessary to remove this disagreement in determination of R_c number. For this we will calculate the Rayleigh number using the following characteristic parameters for the Sun: $P \approx 0.7 \dots 1.0$ [10, 17]; $\nu \leq 2 \cdot 10^9$ m²/s [19]; $h = 10^7$ m [10]; $g_{Sun} = 274$ m/s²; $\Theta = T_2 - T_1 \approx 10^6$. It is needed to mention that value of kinematic turbulent viscosity $\nu \leq 2 \cdot 10^9$ m²/s is confirmed with simple calculation: $\nu = h^2 / \tau_\nu = 10^{14} \text{ m}^2 / (0.72 \dots 1.3) 10^5 \text{ s} = (0.76 \dots 1.4) \cdot 10^9$ m²/s.

During the calculations we suppose that in lower layers of convective zone under, where super-granules are placed, the temperature is changed according to the linear law $T(z) = T_2 - (T_2 - T_1) \frac{z}{h}$ within the range from $T_2 \approx 2.2 \cdot 10^6$ K to $T_1 \approx 1.34 \cdot 10^6$ K [20 - 22]).

In order to calculate the Rayleigh number R_s it is necessary to determine the value of coefficient of volume temperature expansion β of the solar matter.

When calculating β , we will be basing on the fact that the solar matter in convective zone constitutes mix of gases (hydrogen 68% and helium 30% [21]) in the ionization state, i.e. it exists in the form of plasma. In this case we will select the plasma volume as the widening volume, limited with Debye radius [23]: $V = \frac{4\pi}{3} r_D^3$, where

$$r_D = \sqrt{\frac{kT(z)}{4\pi e^2 n(z)}}, \quad n(z) - \text{density of ionized solar matter, } k - \text{Boltzmann constant, } e - \text{electron charge.}$$

In this case the following expression is true for coefficient of volume temperature expansion:

$$\beta(z) = \frac{3}{r_D} \frac{dr_D}{dT} = \frac{3}{2T(z)} \left(1 + \frac{m_s g^*}{k} \left(\left(\frac{dT(z)}{dz} \right)^{-1} - \frac{z}{T(z)} \right) \right) = \frac{3}{2T(z)} \left(1 + \frac{m_s g^*}{k} \frac{T_2 h}{\Theta T(z)} \right), \quad (3)$$

where $m_s = 0.68 m_H + 0.3 \cdot m_{He} = 0.68 m_p + 0.3 \cdot 4 \cdot m_p = 1.88 m_p$ - average mass of solar matter ion, m_p - proton mass. Expression (3) is obtained with use of barometric height formula [24] for solar matter.

In order to determine the Rayleigh number we will use average value of as the coefficient of volume temperature expansion coefficient $\beta = \bar{\beta}(z) = h^{-1} \int_0^h \beta(x) dx$, and select the value for the Prandtl number $P \approx 0.75$. Under selected above values of parameters the coefficient of volume expansion is equal $\beta = 4.179 \cdot 10^{-9} \frac{1}{K}$.

$$\text{Finally obtain value } R_s = \frac{g^* \beta h^3 \Theta}{\nu \chi} = \frac{274 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 4.179 \cdot 10^{-9} \frac{1}{\text{K}} \cdot 10^{21} \text{ m}^3 \cdot 7.9 \cdot 10^5 \text{ K}}{10^9 \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \cdot 1.34 \cdot 10^9 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}} = 675.08, \text{ which quantitatively corresponds to}$$

the critical Rayleigh number R_m for free convection.

Thus, parameters of the super-granule in the quiet Sun phase (in steady state), when the equality $\lambda_{1,1}^- = 0$ is completed, are explicitly described with expression: (1) - (3).

Active Sun phase. Quiet phase of the Sun can be interrupted, if the temperature of the lower boundary of the super-granule will increase within the time Δt , which is significantly lower of the characteristic lifetime of super-granule: $\Delta t \ll \tau_{v1}, \tau_{v2}$, where $\tau_{v1} = (1.4 \pm 0.6) \cdot 10^5$ s or $\tau_{v2} = (1.56 \pm 0.78) \cdot 10^5$ s [10]. Due to internal processes in the Sun, the temperature value of the lower boundary of the several super-granules can reach the value exceeding greatly T_2 [22]. Such change of the temperature increases the Rayleigh number Ra_s , which results in changing the eigenvalue $\lambda_{1,1}^-$ in expressions (1), (2) from zero to negative value, resulting in exponential growth of vertical velocity amplitude (1) with the course of time.

From expression (1), time of vertical speed growth can be estimated, if the following basic parameters are assigned:

- initial solar matter velocity in the center of super-granule 30 m/s [10];
- radial wave number corresponds to the critical value: $k_{r,1} = \pi/\sqrt{2} \approx 2.221$;
- final speed of solar matter outburst is about or exceeds the second orbital velocity 617.7 km/s;
- super-granule lifetime in active phase of the Sun is much less than one in quiet phase of the Sun:
 $t_{v1,v2}^a \approx 10^{-3} \cdot \tau_{v1,v1}$.

In the assumption, that the temperature of the lower boundary of the super-granule increases to the solar core temperature [22], the vertical speed (1) is exponentially grown in accordance with the law $v_z(r, z, t) \propto \exp(|\lambda_{1,1}^- (15.5R_m)|t)$, i.e. solar matter on the cell axis is accelerated.

Estimate the characteristic parameters of the “solar accelerator” in the result of increase of Rayleigh number to the value corresponding the temperature of solar core. Calculations indicate that eigenvalue of the task in this case is $\lambda_{1,1}^- (15.5R_m) \approx -50.0$. Then solar matter acceleration time t_0 , as a minimum, second orbital velocity V_2 is estimated

with a value $T_1 = \frac{\tau_{v1}^a}{50} \ln\left(\frac{6.177 \cdot 10^5}{30}\right) = (2.9 \pm 1.3) \cdot 10$ s or $T_2 = \frac{\tau_{v2}^a}{50} \ln\left(\frac{6.177 \cdot 10^5}{30}\right) = (3.1 \pm 1.55) \cdot 10$ s. Further accept that average acceleration time for the active Sun phase is equal to: $\bar{T} = 3 \cdot 10$ s.

After the solar matter receives second orbital velocity 617.7 km/s, the distance of eruptive outburst constitutes $L_a \approx 7 \cdot 10^8$ m, and outburst time is $T_a \approx 2.24 \cdot 10^3$ s.

It should be noted that solutions (1), (2) and conclusion on the acceleration of solar matter are correct for small amplitudes of the perturbed velocity, when quadratic summands in the system of non-linear Navier–Stokes [18] equations can be neglected [18]. This demand provides limitation on the perturbed vertical velocity of the solar matter $V_z(0,1,t)$:

$$\frac{|\lambda_{1,1}^- (15.5R_m)| 10^7}{\pi \bar{T}} = \frac{50 \cdot 10^7}{\pi \cdot 3 \cdot 10} = 5.3 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \gg |v_z(0,1,t)| \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad (4)$$

which can reach the value of the second orbital velocity V_2 .

Thus, in this section it is offered to study destruction of convective cells on the Sun as a result of quick heating of their lower boundary of the super-granules. Method of determination of coefficient of volume expansion of solar matter is described. Its use of allows to show, that Rayleigh number and corresponding to it wave number for super-granule of the quiet phase of the Sun corresponds to the critical Rayleigh numbers for the free cell. Increase, by order, of the super-granule temperature results in increase of Rayleigh number and in acceleration of the solar matter. It is shown that solar matter acceleration time, for example, to the second orbital velocity, constitutes in average $3 \cdot 10$ s and the solar matter (eruptive flare) takes place within the time about $2.23 \cdot 10^3$ s and stretches for the distance about $7 \cdot 10^8$ m, which is comparable with the Sun radius.

FORMING OF AIR CONVECTIVE CELLS OVER THE CONVECTIVE CELLS IN VACUUM OIL

In order to form the convective cells, vacuum oil BM - 5 (2 ml) and small quantity of aluminum powder were used. The temperature of the lower boundary was kept at the level 120 ± 1 °C, and the one of upper boundary was less by 10 °C. After formation of convective cells in oil, the tank was covered with glass cap, filled with smoke for visualization of convective processes in air.

Fig. 4 shows that air convective cells are formed over the oil surface. Air convective cells have sizes repeating the ones of oil cells. Direction of the convection in air cells corresponds to convection in g cells[11], i.e. reverse to the direction of convection in oil.

Identity of geometrical sizes of convective cells in oil and in air is explained by their similarity. Convective fluxes in oil and in air should be similar, when Rayleigh number and Prandtl number are the same [15, 18]. We will show that

it is true.

Value of the Rayleigh number R is presented in explanation to the expressions (1), (2), where acceleration of gravity on Earth $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ should be substituted instead of g_{Sun} . The data from the Table should be used to calculate the Rayleigh numbers R for air and oil.



Fig. 4. Air convective cells over the convective cells in vacuum oil.

Table

Thermal-physic parameters of the environment [16].

Name of the parameters	Air	Oil
β, K^{-1}	2.68×10^{-3}	2.97×10^{-3}
$\Delta T, \text{°C}$	20	20
L, m	2×10^{-3}	2×10^{-3}
$\nu, \text{m}^2/\text{s}$	2.29×10^{-5}	1×10^{-5}
$\chi, \text{m}^2/\text{s}$	2.216×10^{-7}	7.38×10^{-7}

Based on the data [15] find the relation of Rayleigh numbers (air-oil):

$$\frac{(R)_{oil}}{(R)_{air}} = \frac{9.81 \times 2.97 \times 10^{-3} \times 20 \times 10^{-9}}{7.38 \times 10^{-7} \times 10^{-5}} = \frac{623}{829} = 0.75 \pm 0.3 \quad (5)$$

Result of calculations according to (5) shows, that Rayleigh numbers for air and vacuum oil coincide within the limits of errors of their measurements.

Mirror symmetry of the spatial location and distribution of velocities in convective cells is explained by phenomenon of catching of air particles by moving oil particles on their interface due to development of Kelvin-Helmholtz instability [25].

Thus, the calculations show that Rayleigh numbers for two environments get into the interval where they are equal. It goes from this that convective cells, formed in air and in oil are similar, i.e. are described by the same solutions.

CONCLUSIONS

Experiments on research of destruction of convective cells are presented in this paper. Destruction of convective cells was carried out by two methods. The first one consists in dropping the micro-drop of the cooled vacuum oil on the surface of the formed convective cells. The micro-drop exists on the surface for a long time due to Leidenfrost effect. The second method consists in local change of temperature of the upper boundary of the layer with heated copper wire of a large diameter. Destruction of convective cells on the Sun, as a result of quick heating of their lower boundary, was studied as an example. Mathematical justification of such destruction was presented. Method of definition of solar matter coefficient of volume expansion was described. It provided a possibility to show that Rayleigh number for super-granule corresponds to critical Rayleigh number for the free cell. It is shown that greatly increase of the super-granule lower temperature results in increase of Rayleigh number and as a sequence in acceleration of the solar matter. At this acceleration time of the solar matter to second orbital velocity constitutes $3 \cdot 10 \text{ s}$, and solar matter carrying-out (eruptive flare) takes place within the time about $2.23 \cdot 10^3 \text{ s}$, and stretches for the distance about $7 \cdot 10^8 \text{ m}$, which is comparable with the Sun radius.

Experimental result on forming the air convective cells over the convective cell from vacuum oil is described and analyzed. Explanation of correspondence of sizes of air convective cells and convective cells in oil is provided.

REFERENCES

1. Bernard H. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquid // *Revue generale des Sciences, pures et appliques.* - 1900. - Vol. 11. - P.1261-1271 and 1309-1328.
2. Bozbiei L.S. An elementary convective cell in layer of incompressible viscous fluid // *Conference of Young Scientists and Specialists.* - IPMash NAN of Ukraine, Kharkov, 2013. - P. 29.
3. Bozbey L.S., Kostikov A.O., Tkachenko V.I. Elementary convective cell in the layer of incompressible, viscous liquid and its physical properties // *International conference MSS-14 «Mode conversion, coherent structures and turbulence».* - Space Research Institute, Moscow, 2014. - P. 322-328.
4. Goldstein R.J., Graham D.J. Stability of a horizontal fluid layer with zero shear boundaries // *Phys. Fluids.* - 1969. - Vol. 12. - No. 6. - P. 1133 - 1137.
5. <http://oceanfromspace.scanex.ru/index.php/atmosphere/convectiveyacheik>
6. Eckert K., Bestehorn M., Thess A.E. Square cells in surface-tension-driven Bernard convection: experiment and theory // *J. Fluid Mech.* - 1998. - Vol. 356. - P. 155-197.
7. Linke H., Aleman B.J., Melling L.D., Taormina M.J., Francis M.J., Dow-Hygelund C.C., Narayanan V., Taylor R.P., Stout A. Self-Propelled Leidenfrost Droplets // *Phys. Rev.* - 2006.- Vol. 96. - Iss. 15. - P. 154502-1 – 154502-4.
8. Pikelner S.B. The dynamics of the solar atmosphere // *UFN.* - 1966. - Vol. 88. - Issue. 3. - P. 505–523.
9. <http://opensky.library.ucar.edu/collections/SOARS-000-000-000-268>
10. Rieuton M., Rincon F. The Sun's Supergranulation // *Living Rev. Solar Phys.* - 2010. - Vol. 7. - No. 2. - P. 84.
11. Getling A.V. Formation of spatial structures of Rayleigh-Benard convection // *UFN.* - 1991. - Vol. 161. - Issue. 9. - P. 1–80.
12. http://www.bbc.co.uk/russian/multimedia/2013/05/130515_v_solar_flares.shtml
13. http://www.bbc.co.uk/russian/multimedia/2014/09/140901_solar_flares.shtml
14. Grigorjeva S.Yu. Research of eruptive events on the Sun by observations on RATAN-600 // *Abstract of thesis for academic degree of candidate of physics-mathematics sciences.* - Saint-Petersburg: Main Astronomical Observatory of the RAS, 2010. - 21 p.
15. Gershuny G.Z., Zhuhovickiy E.M. Convective stability of incompressible fluid. - Moscow: Nauka, 1972. - 393 p.
16. Volkov A.I., Gharskiy I.M. Big chemical reference book. - Minsk: Sovremennaya shkola, 2005. - 608 p.
17. Sotnikova R. T., Farstein V.G. Introduction to helium physics. - Irkutsk: IGU, 2013.-256 p.
18. Landau L.D., Lifshitz E.M. Theoretical physics: Vol. 6. Hydrodynamics. - Moscow: Science, 1986. - 736 p.
19. Pipin V.V. Variations of luminosity, radius and quadrupole moment of the sun as a result of dynamo large-scale magnetic fields in solar convective zone // *Astronomical journal.* - 2004. - Vol. 81. - No. 5. - P. 459–474.
20. Yakubovsky E.G. Mechanism of appearance of heat energy of the planets // *International journal of applied and fundamental research.* - 2012. - No 7. - P. 46-51.
21. Physical encyclopedia. Vol. 4 / Ed. by A.M. Prokhorov. - Moscow: Great Russian Encyclopedia, 1994. - 704 p.
22. Bahcall J.N., Huebner W.F., Lubow S.H., Parker P.D., Ulrich R.K. Standard solar models and the uncertainties in predicted capture rates of solar neutrinos // *Reviews of Modern Physics.* - 1982. - Vol. 54. - No. 3. - P. 767 - 799.
23. Akhiezer A.I. Plasma electrodynamics. - Moscow: Science, 1974. - 720 p.
24. Landau L.D., Lifshitz E.M. Theoretical physics. Static physics / 3 issue. correct. - Moscow: Science, 1976. - 584 p.
25. Lamb G. Hydrodynamics. - Moscow: OGIZ Gostechizdat, 1947. - 928 p.

PACS: 07.05.Tp; 02.70.-c; 23.20.Ra

CALCULATION OF (e^+ , e^-)-PAIR CONTRIBUTION TO THE SPECTRA OF ELECTRONS SCATTERED BY NUCLEI

I.S. Timchenko, A.Yu. Buki

National Science Center "Kharkov Institute of Physics & Technology"

1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine

e-mail: timchenko@kipt.kharkov.ua

Received June 3, 2015

The electronuclear measurements always include the background from the (e^+ , e^-)-pair photoproduction reaction in the target. The attempt to take into account this background through its computation by usual methods with applying the computation program GEANT-3 has appeared impractical, since it would take several years for the PC to operate. The present paper describes the technique, which permits one to reduce the time required for the PC computation of the background to a few hours. The developed technique has been verified by carrying out computations of the background from the (e^+ , e^-)-pairs for the conditions, at which this background was measured at Saclay. The comparison between the calculated data and the experimental results has shown their agreement.

KEYWORDS: electronuclear measurements, target, pair photoproduction, background, simulation

РОЗРАХУНОК ВКЛАДУ (e^+ , e^-)-ПАР В СПЕКТРИ ЕЛЕКТРОНІВ, РОЗСІЯНИХ НА ЯДРАХ

І.С. Тімченко, О.Ю. Буки

Національний Науковий Центр «Харківський фізико-технічний інститут»

вул. Академічна 1, м. Харків, 61108, Україна

В даних електроядерних вимірювань присутній фон від фотонародження (e^+ , e^-)-пар в мішені. Спроба врахувати цей фон шляхом його розрахунку показала, що при звичайній методології використання обчислювальної програми GEANT-3 такий розрахунок неможливий, тому що необхідний для нього час роботи ПК складає порядок кількох років. В даній роботі розглянута методика, яка дозволяє зменшити час роботи ПК, що потрібен для розрахунку цього фону, до кількох годин. Перевіркою знайденої методики стали виконані за її допомогою розрахунки (e^+ , e^-)-фону для умов, при яких цей фон був виміряний в лабораторії Saclay. Порівняння результатів розрахунку та експерименту показало їх узгодження.

KEYWORDS: електроядерні вимірювання, мішень, фотонародження пар, фон, моделювання

РАСЧЁТ ВКЛАДА (e^+ , e^-)-ПАР В СПЕКТРЫ ЭЛЕКТРОНОВ, РАССЕЯННЫХ НА ЯДРАХ

И.С. Тимченко, А.Ю. Буки

Национальный Научный Центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина

В электронuclearных измерениях всегда присутствует фон от фоторождения в мишени (e^+ , e^-)-пар. Попытка учесть этот фон путём его расчёта показала, что при обычной методологии применения вычислительной программы GEANT-3 такой расчёт невозможен, так как необходимое для него время работы ПК порядка нескольких лет. В настоящей работе разработана методика, которая позволяет уменьшить требующееся для расчёта этого фона время работы ПК до нескольких часов. Проверкой найденной методики были выполнены с её помощью расчёты фона от (e^+ , e^-)-пар для условий, при которых этот фон был измерен в лаборатории Saclay. Сравнение результатов расчёта и эксперимента показало их согласие.

KEYWORDS: электронuclearные измерения, мишень, фоторождение пар, фон, моделирование

The electron-nucleus scattering spectrum comprises the contribution of electrons from the (e^+ , e^-)-pair photoproduction reaction in the target. Its measurement procedure includes the magnetic polarity reversal of the spectrometer, and the measurement of the positron spectrum, which is similar to the electron spectrum from (e^+ , e^-)-pairs. However, these measurements may take a substantial part of the time of experiment, i.e., costly running time of the accelerator. Therefore, it is reasonable to replace the measurements of the background by its computation.

The spectrum of positrons escaping from the electron-irradiated target can be calculated by the numerical simulation methods, using the computation program GEANT-3 [1] for the purpose. However, the estimation of time required for this computation has shown that it would take no less than 10^4 stream days of the PC. Hence, should the need arise to calculate the background of (e^+ , e^-)-pairs, then for the solution of the problem it would be necessary to change the computation procedure in such a way as to increase the computing speed by several orders of magnitude. Precisely this optimization of computation is the aim of the present work.

(e^+ , e^-)-PAIR PRODUCTION IN THE TARGET BOMBARDED BY ELECTRONS

The (e^+ , e^-)-pair production in the electron-irradiated target is the result of two nuclear reactions occurring one after another, viz., bremsstrahlung photon emission by incident electron ($e^- \rightarrow (e^-, \gamma)$ reaction), and electron-positron pair production by this photon ($\gamma \rightarrow (e^+, e^-)$ reaction). The calculation of the bremsstrahlung photon spectrum is one of the procedures, which is executed by the GEANT-3 program most often. As regards the (e^+ , e^-)-pair photoproduction, the cross-section for this reaction can be calculated at certain conditions with the use of analytical formulas from [2].

The comparison between the data calculated by those formulas and the results of computations by the GEANT-3 program is given in Fig. 1. It is obvious from the figure that at positron energies E' , which correspond to the conditions of application of the equations of [2], the data calculated by those equations are in agreement with the CEANT-3 computations. Let electrons incident on the target have equal energies E_0 . The bremsstrahlung caused by these electrons presents a continuous spectrum with photon energies E_γ ranging from 0 up to $E_0 - m_e$, where m_e is the electron mass. We write down the yield of bremsstrahlung photons of energy E_γ in terms of the differential cross-section $d\sigma_{e^-, \gamma}(E_0, E_\gamma)/dE_\gamma$ for the reaction $e^- \rightarrow (e^-, \gamma)$

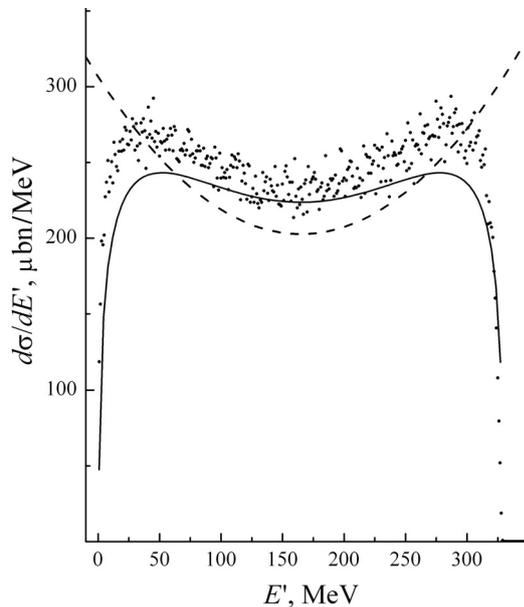


Fig. 1. Differential cross-section for (e⁺, e⁻)-pair photo-production by ⁶Li versus positron energy E' .

The photon energy is $E_\gamma = 330$ MeV. The points show the GEANT-3 computations, the dashed line is the complete screening case, (eq. (33.20), [2]), the solid line – absence of screening (eq. (33.19), [2]).

energy E_0 :

$$N'_{e^+}(E_0, E') = \int_0^{E_0 - m_e} \frac{d\sigma_{\gamma, e^+}(E_\gamma, E')}{dE'} \times \frac{d\sigma_{e^-, \gamma}(E_0, E_\gamma)}{dE_\gamma} n_{e^-} n_n^2 dE_\gamma. \quad (3)$$

It is not difficult to see that (3) describes the case, where the bremsstrahlung photons are emitted in the target of thickness n_n , and then, in the other target of the same thickness these photons give rise to the production of (e⁺, e⁻)-pairs. What actually happens is that the bremsstrahlung photon emission takes place over the whole electron trajectory in the target substance. We divide the target thickness into K identical layers. In a thin target, the yield of bremsstrahlung from each layer is the same, and this yield from an arbitrary i -th layer can be written as

$$N_{\gamma, i}(E_0, E_\gamma) = N_\gamma(E_0, E_\gamma) / K, \quad (4)$$

where $N_\gamma(E_0, E_\gamma)$ is determined by (1). However, the probability of inducing the (e⁺, e⁻)-pair photoproduction reaction depends on the number of layers between the point of photon emission and the back surface of the target. For example, for the photon emitted near the front surface of the target, the probability of occurrence of the $\gamma \rightarrow (e^+, e^-)$ reaction is maximum, whereas the photon, emitted near the back surface of the target, immediately leaves the target substance, and thus cannot induce any reaction. We numerate the layers starting from the front target surface downstream. Then the number of (e⁺, e⁻)-pairs produced by the photons from the i -th layer will be given by

$$N_{e^+, i}(E_0, E') = N'_{e^+}(E_0, E') \times (1 - i/K) / K. \quad (5)$$

Let us make summation of equation (5) from $i = 1$ up to $i = K - 1$, and let K tend to infinity. As a result, we obtain the expression for the positron yield from all bremsstrahlung photons produced in the target exposed to electrons of energy E_0

$$N_{e^+}(E_0, E') = N'_{e^+}(E_0, E') \times 1/2, \quad (6)$$

where $N'_{e^+}(E_0, E')$ is determined by (3).

where n_e is the number of electrons arrived at the target, n_n is the target thickness represented as the number of nuclei per cm². The yield of positrons of energy E' from the (e⁺, e⁻)-pair photoproduction reaction is represented similarly by

$$N_\gamma(E_0, E_\gamma) = \frac{d\sigma_{e^-, \gamma}(E_0, E_\gamma)}{dE_\gamma} n_e n_n, \quad (1)$$

$$N_{e^+}(E_\gamma, E') = \frac{d\sigma_{\gamma, e^+}(E_\gamma, E')}{dE'} n_\gamma n_n. \quad (2)$$

Here $d\sigma_{\gamma, e^+}(E_\gamma, E')/dE'$ is the differential cross-section for the reaction $\gamma \rightarrow (e^+, e^-)$; n_γ is the number of photons that hit the target and have the energy E_γ . The variable n_γ is the yield $N_\gamma(E_0, E_\gamma)$, which is determined by (1). Substituting (1) for the variable n_γ in (2), and then integrating (2) over the whole spectrum of bremsstrahlung photons, we obtain the positron spectrum originating from the electrons of

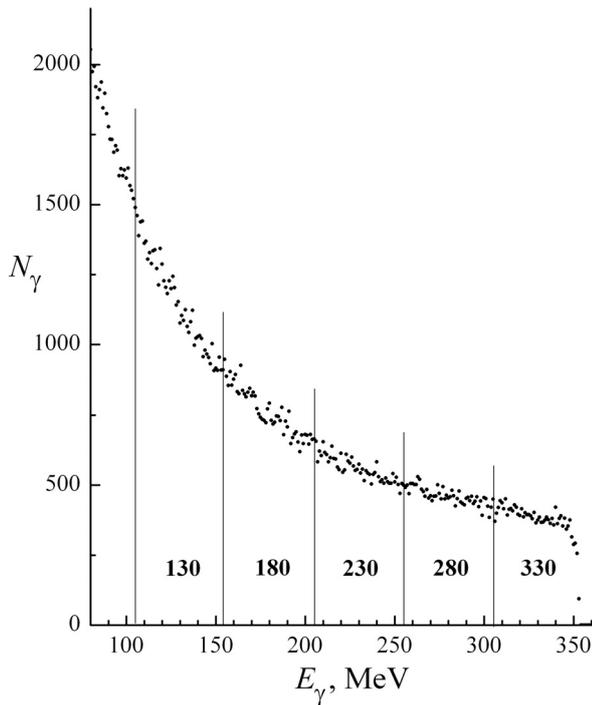


Fig. 2. Photon bremsstrahlung spectrum calculated by GEANT-3.

Vertical lines show energy intervals, $\Delta E_\gamma = 50$ MeV in width, bold-faced figures show average energies $E_{\gamma,L}$ for the intervals.

weighting factor that would normalize the spectrum to the number of electrons, which should fall on the target in order for the spectrum to be obtained. In view of the normalization, the sum representing the positron spectrum may be written as

$$N_{e^+}(E_0, E') = \sum_L \frac{N_{e^+,L}(E_0, E')}{n_\gamma \times \eta_L}. \quad (7)$$

THE SPECTRUM OF POSITRONS COMING TO THE SPECTROMETER

Experimental positron spectra measured from ^{208}Pb at $E_0 = 354$ and 645 MeV have been given in paper [3]. For the purposes of comparison between the computed results and the experimental positron yield, we have used in our computations the spectrum measurement conditions [3], i.e., the target thickness in units of radiation length $t_0 = 1.6 \times 10^{-2}$, the exit angle $\theta = 60^\circ$, acceptance angle of the spectrometer $\Delta\Omega_0 = 7 \times 10^{-3}$ sr. Besides, the positron yield from the ^{208}Pb target was calculated at $E_0 = 354$ MeV, $\theta = 20^\circ$, and from the ^6Li target of thickness $t_0 = 0.3 \times 10^{-2}$ rad. length at $E_0 = 260$ MeV, $\theta = 15^\circ$ and 35° .

Further, the computations are exemplified by the ^{208}Pb target and $E_0 = 354$ MeV.

If we assume that the collimator of the spectrometer is a square in section, then using the $\Delta\Omega_0$ value it is not difficult to calculate the acceptance of the spectrometer in the scattering angle: $\Delta\theta = 4.8^\circ$. The positron yield is axially symmetric. Therefore, to speed up the computation, we replace the acceptance of spectrometer $\Delta\Omega_0$ by the solid angle included between the cones with openings $2\theta_1$ and $2\theta_2$, where $\theta_1 = \theta - \Delta\theta/2$ and $\theta_2 = \theta + \Delta\theta/2$. This solid angle is $\Delta\Omega = 2\pi(\cos\theta_1 - \cos\theta_2)$ sr. If on a certain interval $\Delta\theta' > \Delta\theta$, the N_{e^+} yield is assumed to be a linear function of θ , then in the computations, $\Delta\Omega$ may be replaced by $\Delta\Omega' = 2\pi(\cos\theta'_1 - \cos\theta'_2)$ sr, where $\theta'_1 = \theta - \Delta\theta'/2$ and $\theta'_2 = \theta + \Delta\theta'/2$. The linearity is testified by a weak deviation from the unity ratio given below

$$R = \frac{N'_{e^+}/\Delta\Omega'}{N_{e^+}/\Delta\Omega}. \quad (8)$$

Here $N'_{e^+}/\Delta\Omega'$ is the yield of positrons N'_{e^+} in case of a larger solid angle $\Delta\Omega'$, normalized to this angle, $N_{e^+}/\Delta\Omega$ is the same for the smaller solid angle. In practical terms, it may be considered that if $\Delta\theta$ is between 1° and 5° , and $\Delta\theta' \geq 2\Delta\theta$, then the deviation from the unity ratio R roughly corresponds to the relative error in the calculated yield N'_{e^+} value,

This expression can be represented as a structure consisting of two hypothetical targets. The first target A of thickness $\frac{1}{2}n_n$ generates bremsstrahlung photons, and in the second target B of thickness n_n the photons from the first target give rise to (e^+, e^-) -pairs. We call this representation of the target as the “double target” (DT) model.

The computation of the bremsstrahlung photon spectrum does not take much time of PC operation. Fig. 2 exemplifies the result of the computation of this spectrum. We divide the spectrum into several similar energy intervals of width ΔE_γ , the average energy in each interval being $E_{\gamma,L}$. Let us consider the spectrum under discussion as a set of several groups of monoenergetic photons, each group having the energy $E_{\gamma,L}$ with the number of photons $N_{\gamma,L}$, which have this energy. The $N_{\gamma,L}$ value is determined by the area of the spectral region lying within the photon energy range $E_{\gamma,L} \pm \Delta E_\gamma/2$. The number of photons per bremsstrahlung photon from the L -th interval is given by $\eta_L = n_{e^-}/N_{\gamma,L}$.

We apply GEANT-3 for computing the passage of photons of energy $E_{\gamma,L}$ through the target B (the DT model). If the number of photons is sufficient, then, as a result, for the photon group of energy $E_{\gamma,L}$ we obtain the positron yield in the form of the spectrum $N_{e^+,L}(E_0, E')$. After computations for all the energies of monoenergetic photons, it is necessary to sum the positron spectra corresponding to these photons. However, for each positron spectrum of that sum we need to have the

which arises due to the increase in the solid angle from $\Delta\Omega$ to $\Delta\Omega'$. The admissible value of the error depends on the (e⁺, e⁻)-pair background contribution to the electron spectrum. In our yield calculations at $\theta = 60^\circ$, the angular acceptance of the spectrometer specified the angle $\Delta\theta = 4.8^\circ$, and for the computation we took $\Delta\theta' = 10^\circ$, which was consistent with $\Delta\Omega' = 0.95$ sr and $R = 1.1 \pm 0.1$.

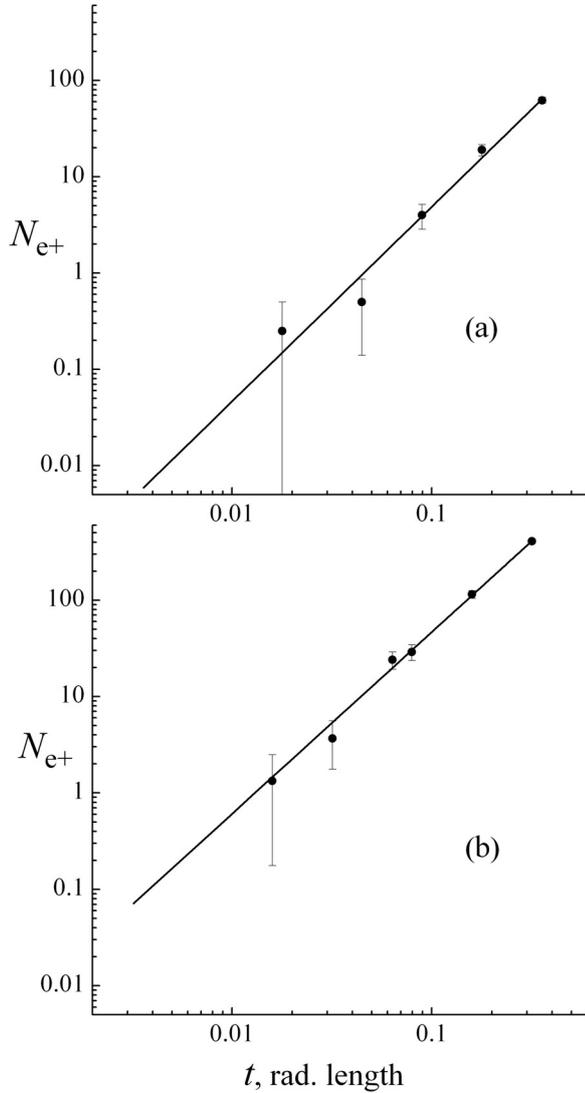


Fig. 3. Positron yields N_{e^+} versus target thickness t .

a) The points show the calculation for the ²⁰⁸Pb target at $E_\gamma = 330$ MeV and $\theta = 60^\circ$, the solid line is the result of function (9) fitting to the points; b) the same but for the ⁶Li target at $E_\gamma = 250$ MeV and $\theta = 15^\circ$.

$\theta = 15^\circ$ and 35° .

The calculation results relating to each of the energies E_γ were reduced to the same number of photons $n_{\gamma,0}$, which corresponds, according to the DT model, to the photon yield from the target A , as n_e electrons are incident on it. Then the calculated positron yields were fitted with the function

$$N_{e^+}(t) = A \times t^p \quad (9)$$

where A and p are the variable parameters (Fig. 3). The powers resulting from fitting were as follows: $p = 2.0$ to 2.1 for the lead target; 1.6 to 1.9 for the lithium target. On substitution of the target A thickness t_0 into function (9) with the obtained parameters, we get the positron yield from the target under consideration. We denote this yield by $N_{e^+,m}(t_0)$, and assume that the $N_{e^+,m}(t_0)$ value, derived in this way, has been determined with a reasonable degree of accuracy. However, it took more than 24 hours of PC operating time to compute the positron yield, which corresponds to one

For all that, the application of the above-given technique shows that the PC operation for a few hours ensures the computation of positron yield from the ²⁰⁸Pb target within a statistical uncertainty of about 10%, but only for $t \geq 0.1$ rad. length, while the real target thickness t_0 is of about 0.01 rad. length. One can try to calculate the positron yield from such thin targets by carrying out the following operating sequence:

- calculation of the yield N_{e^+} for a set of values of $t \geq 0.1$ rad. length;
- the finding of the function $N_{e^+}(t)$, which adequately describes these calculated data;
- extrapolation of the function $N_{e^+}(t)$ to the region of $t < 0.1$ rad. length, i.e., $t = t_0$.

The success of applying the described procedure depends on the choice of the function $N_{e^+}(t)$. Let us examine the function.

If in the passage of the photon through the substance only the reaction of (e⁺, e⁻)-pair photoproduction took place, then, as it follows from the definition of the term "reaction cross-section", the positron yield would be linearly dependent on the target thickness: $N_{e^+,1} \propto t$. To arrive at the spectrometer, the as-produced positron should be scattered through the angle $\theta \pm \Delta\theta/2$, which results from positron interaction with the target substance. If this interaction is described only by the cross-section for scattering by the electron, then the positron yield should also be linearly dependent on the target thickness $N_{e^+,2} \propto t$. Since both the photoproduction and scattering reactions take place in the target B in sequence, then the yield for the positron coming to the spectrometer can be written as $N_{e^+} \propto t^2$. At small target thicknesses, the large-angle positron trajectory deviation occurs mainly due to positron-electron scattering. However, at these conditions other, less probable, processes manifest themselves. Therefore, in the t -dependence of N_{e^+} under consideration, the exponent on t is not exactly equal to 2. The GEANT-3 program can calculate the processes that exert influence on the positron motion in the substance. Using this program, we have calculated a variety of positron yields in a wide range of t values for the following cases: ²⁰⁸Pb target at $E_\gamma = 330$ and 610 MeV, exit angle $\theta = 60^\circ$; ²⁰⁸Pb target at $E_\gamma = 330$ MeV, $\theta = 20^\circ$; and also, ⁶Li target at $E_\gamma = 250$ MeV,

photon energy value. This time consumption is admissible in the elaboration of the computation procedure, but is undesirable in actual practice.

A further computational shortcut consisted in choosing the optimum set of the yields to be computed. So, from the array of N_{e^+} for a wide range of t values employed to obtain the yield $N_{e^+,m}(t_0)$, different sets of these values were chosen, and function (9) was fitted to them. Each fitting gave its $N_{e^+,j}(t_0)$, where the index j denoted the set of computed yields used in the fitting. As a result, the group of $N_{e^+,j}(t_0)$ values was formed, from which the nearest to $N_{e^+,m}(t_0)$ were chosen. The computations were carried out at different photon energies and angles of scattering by ^{208}Pb and ^6Li targets. As a result, the most optimum set was found to consist of two yields corresponding to the target thicknesses $t \approx 0.08$ and 0.33 rad. length. The $N_{e^+,j}(t_0)$ values computed on the basis of these yields differed from the $N_{e^+,m}(t_0)$ values by no more than 10% or 15%. This difference specifies the limit of accuracy of further computations, where the computed positron yields corresponding to the mentioned thicknesses are used to obtain the yield $N_{e^+}(t_0)$.

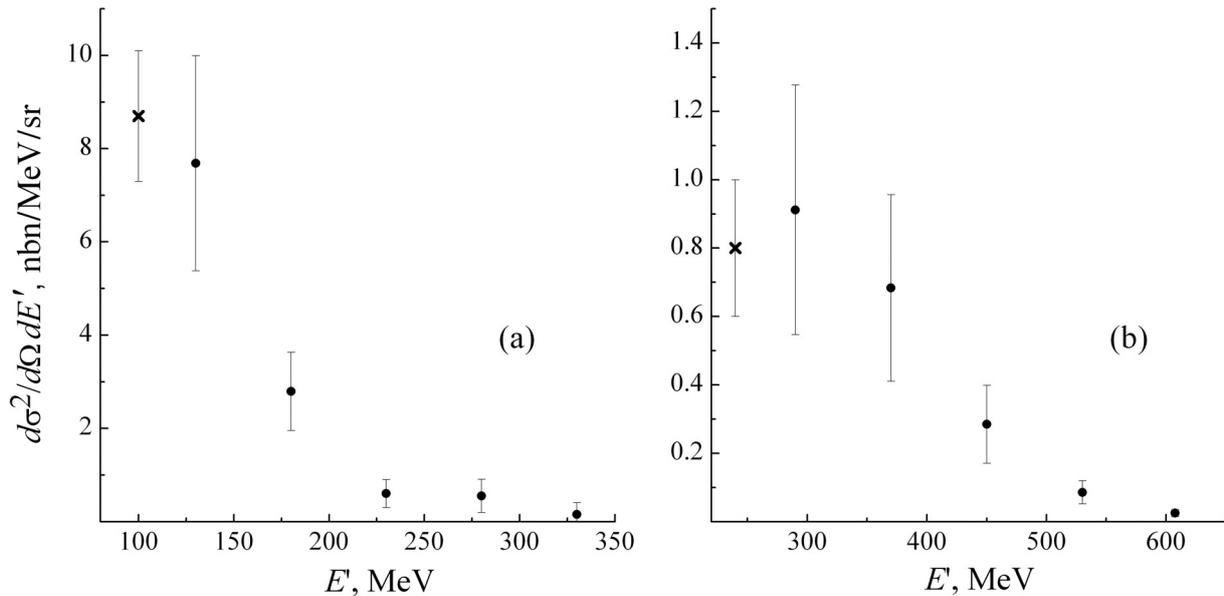


Fig. 4. Positron spectrum

a) ^{208}Pb target, 1.6×10^{-2} rad. lengths thick, at $E_0 = 354$ MeV and $\theta = 60^\circ$. The points show the present calculated data; the cross shows the experimental value taken from [3]; b) the same but for the positron spectrum corresponding to $E_0 = 645$ MeV.

Using this method, we calculate the positron yield from the ^{208}Pb target at $\theta = 60^\circ$ for photons of energies 130, 180, 230, 280, 330 MeV. Then, by means of (7) we obtain the positron spectrum corresponding to the electrons of energy $E_0 = 354$ MeV incident on the target. As stated above, a similar spectrum was obtained by experiment in work [3]. From the figure given there¹, the yield of positrons of energy $E' = 100$ MeV can be estimated to be 8.7 ± 1.4 nbn $\text{MeV}^{-1} \text{sr}^{-1}$, this being consistent with our calculated data (Fig. 4a). The authors of paper [3] also gave the experimental positron spectrum from the ^{208}Pb target measured at $E_0 = 645$ MeV, $\theta = 60^\circ$. Our positron spectrum calculations carried out for this case are also in agreement with the experimental result (Fig. 4b).

In the experimental works [4] and [5] the important results of the Coulomb Sum values of ^6Li and ^7Li respectively were obtained, however the detailed measurements of positrons emission from the target were not carried out and so the background of (e^+, e^-) -pairs wasn't taken account. Using the developed method we calculated the positrons spectra for typical measurement conditions [4,5]: $E_0 = 260$ MeV, $\theta = 35^\circ$ and $E_0 = 135$ MeV, $\theta = 160^\circ$. According to the performed calculations, the maximum value of ratio the (e^+, e^-) -pairs background to the scattered electrons yield was 4×10^{-4} in the case of $\theta = 35^\circ$, and was 5×10^{-3} in the case of measurements under $\theta = 160^\circ$. These obtained values correspond to the tails of quasy-elastic electron scattering peaks, where the experimental errors amount to 20% ÷ 50%. Thus the neglecting of the background of (e^+, e^-) -pairs in works [4] and [5] may be consider as justified.

¹ For ease of comparison between our present calculations and the data of [3], Fig. 4 shows the (e^+, e^-) -par background in the same form [3], i.e., as a twice differential cross-section. It should be noted that this representation of the (e^+, e^-) -par background is incorrect. That is, in view of the $e^- \rightarrow (e^-, \gamma)$ reaction taking place in the target A , the yield of the (e^+, e^-) -par background is $N_{e^+} \propto t^3$. However, according to the definition of the reaction "cross-section", the reaction yield is directly proportional to the target thickness. Therefore, what is shown here in Fig. 4 and in Figs. of [3] may be called "the pseudo cross-section" corresponding to the target thickness t ". If comparison is made between two pseudo cross-sections corresponding to the same target thickness (Fig. 4), or between the reaction cross-section and the background cross-section [3] (both cross-sections being measured on the same target), then in both cases this is merely the comparison between two yields represented in not exactly correct form.

CONCLUSION

The main result of the present paper lies in the development of the methods, which in the case of electronuclear experiment enable one to compute (with a PC) the background of (e⁺, e⁻)-pair photoproduction on both heavy- and light- nuclear targets (²⁰⁸Pb and ⁶Li, respectively). In each case, it took about 12 hours for the PC to compute the positron spectra by these methods (Fig. 4a, b), which may be considered quite acceptable for practical work.

REFERENCES

1. GEANT 3. Detector description and simulation tool. CERN program library. 1993.
2. Akhiezer A.I., Berestetsky V.B. Quantum electrodynamics. – M.: State Publishing House of Technical-and-Theoretical Literature, 1953. – 428 p.
3. Zghiche A., Danel J.F., Bernheim M., et al. Longitudinal and transverse responses in quasi-elastic electron scattering from ²⁰⁸Pb and ⁴He // Nucl. Phys. – 1994. – Vol. A572. – P. 513-559.
4. Buki A.Yu., Timchenko I.S., Shevchenko N.G. Saturation of Coulomb sum rules in the ⁶Li case // Eur. Phys. J. – 2012. – Vol. A48 (2). – P. 17. (DOI 10.1140/epja/i2012-12017-6)
5. Buki A.Yu., Shevchenko N.G., Timchenko I.S. The coulomb sums for ⁷Li nucleus at 3-momentum transfers $q = 1.250 \div 1.625$ fm⁻¹ // PAST. – 2009. – No.3(51). – P. 38-42.

PACS: 41.75.Ht, 41.75.Lx, 41.75.Jv, 96.50.Pw, 533.9.

INFLUENCE OF EMITTANCE ON TRANSVERSE DYNAMICS OF THE ACCELERATED BUNCHES IN PLASMA-DIELECTRIC WAKE FIELD ACCELERATOR

R.R. Kniaziev

V.N. Karazin Kharkiv National University

Kharkiv, Svobody sq.4, 61022

e-mail: rkniaziev@gmail.com

Received 19 June, 2015

In this paper transverse dynamics of charged bunch particles in plasma-dielectric wake field accelerator on an example of a gigahertz range dielectric waveguide is researched, bunch parameters correspond to bunches obtainable at Argonne National Laboratory. Analytical expressions for calculating wakefields and equations for modeling bunch particle motion are provided. The behavior of the boundary bunch particle for different values of the initial emittance was modeled. It was shown, that the amplitude of motion of the boundary bunch particles changes on time.

KEYWORDS: acceleration, focusing, wake field, bunches, dielectric waveguide, plasma, emittance

ВЛИЯНИЕ ЭМИТТАНСА НА ПОПЕРЕЧНУЮ ДИНАМИКУ УСКОРЯЕМЫХ СГУСТКОВ В ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ КИЛЬВАТЕРНОМ УСКОРИТЕЛЕ

Р.Р. Князев

ХНУ им. В.Н. Каразина

г. Харьков, пл. Свободы, 4, 61022

В работе исследуется поперечная динамика заряженных частиц пучка в плазменно-диэлектрическом кильватерном ускорителе на примере диэлектрического волновода гигагерцового диапазона, параметры пучков соответствуют пучкам, получаемым в Аргонской лаборатории. Приведены аналитические выражения для расчета кильватерных полей и уравнения для моделирования движения частиц сгустка. Промоделировано поведение краевой частицы пучка при разных значениях начального эмиттанса. Получены зависимости для огибающих пучка для разных значений начального эмиттанса. Показано что амплитуда движения краевых частиц пучка изменяется со временем.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ускорение, фокусировка, кильватерные поля, пучки, диэлектрический волновод, плазма, эмиттанс

ВПЛИВ ЕМИТТАНСА НА ПОПЕРЕЧНУ ДИНАМІКУ ПРИСКОРЮВАНИХ ЗГУСТКІВ В ПЛАЗМОВО-ДИЕЛЕКТРИЧНОМУ КІЛЬВАТЕРНОМУ ПРИСКОРЮВАЧІ

Р.Р. Князев

ХНУ ім. В.Н. Каразіна

м. Харків, пл. Свободи, 4, 61022

В роботі досліджується поперечна динаміка заряджених частинок згустку в плазмово-діелектричному кильватерному прискорювачі на прикладі діелектричного хвилеводу гігагерцового діапазону, параметри згустків відповідають згусткам, які отримуються в Аргонській лабораторії. Подано аналітичні вирази для розрахунку кильватерного поля та рівняння для моделювання руху частинок згустку. Промодельована поведінка граничної частинки згустку при різних значеннях початкового еміттансу. Отримані залежності для оминаючих згустку при різних значеннях початкового еміттансу. Показано що амплітуда руху граничних частинок згустку має залежність від часу.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: прискорення, фокусування, кильватерні поля, згустки, діелектричний хвилевод, плазма, еміттанс

Accelerator physics is actual, thriving branch of modern physics. One of the new methods of acceleration, that allows significantly reducing weight and sizing characteristics of accelerators, is method of accelerating charged particles by wakefields [1,2]. An important characteristic of any accelerator is luminosity of the accelerated bunch, which is determined by the density of the bunch and its phase volume. The final phase volume is determined by the transverse dynamics of the particles, so knowing it, we can judge about transverse stability and final phase volume of accelerated bunch. In this paper transverse dynamics of charged bunch particles in plasma-dielectric wakefield accelerator on an example of a gigahertz range dielectric waveguide is researched. Parameters of charged particles bunches are taken in accordance with the experiments carried out in the Argonne Laboratory. Excitation of electromagnetic fields by concentrated sources in the hybrid plasma-dielectric structure allows increasing the rate of acceleration. This provides simultaneous radial-phase focusing. Compared with pure plasma variant [3-5], hybrid plasma-dielectric structures [6] provide greater wave stability and are less sensitive to the temporal and spatial changes of the plasma density [7]. The goal of this work: study the behavior of accelerated charged particles bunch in plasma-dielectric wake field accelerator, to analyze the transverse dynamics of bunch in PDWA with different values of the initial emittance of bunch.

STATEMENT OF THE PROBLEM

Consider a structure that is infinitely long waveguide with an annular dielectric shell (look figure Fig.1). The dielectric constant of this shell is ϵ . Inside the dielectric shell (in the transit channel) there is plasma with density n_p . Along the axis of the waveguide drive bunch moves, which excites the wake field [8]. After some time, collinear to

drive bunch, accelerated bunch is injected. Delay time is selected so accelerated bunch was simultaneously at maximum of accelerating field.

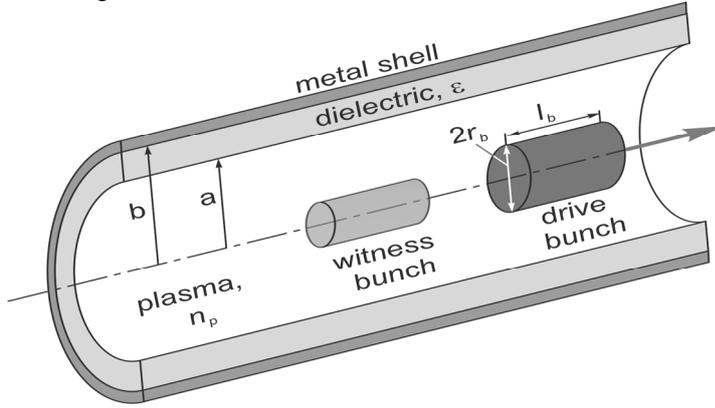


Fig. 1. Geometry of structure.

a – the inner radius of the dielectric shell; b – the outer radius of the dielectric shell; n_p – plasma density; r_b – bunch radius; l_b – bunch length; ε - dielectric constant.

However, the radial electric field of the Langmuir wave still far exceeds the total transverse field of dielectric modes. These two types of waves – Langmuir and dielectric – generally have different spatial periods; therefore, the maximum of total longitudinal field can correspond to a minimum of a full transverse field. Thereby, when placing a test bunch in the maximum of dielectric wave accelerating field we can simultaneously focus it by Langmuir wave's field.

While solving the problem of focusing the accelerated bunch we must not forget that there is also a defocusing force. The main causes of defocusing forces are Coulomb field and the initial emittance of the bunch. It was shown [11], that the influence of the Coulomb field on the focusing of charged particles bunches in the plasma-dielectric structures with the density of the plasma and bunch charges, with which we work, is negligible. We assume that terms describing the quasi-static component of wake field are equal to zero. This will greatly simplify the expression, describing electromagnetic fields, excited by driver bunch in plasma dielectric accelerator.

BASIC EQUATION

The nature of the transverse motion of the particles is determined by solution of the equation of the envelope [12]:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} + \frac{e\beta H_\phi(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \left(\frac{dr}{dz}\right)^2 + \frac{eE_z(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \frac{dr}{dz} - \frac{e(E_r(r, z, t) - \beta H_\phi(r, z, t))}{m\gamma\beta^2 c^2} - \frac{emit_n^2}{r^3 \beta^2 \gamma^2} = 0. \quad (1)$$

To solve the equation (1) we must specify γ and t . The equations describing γ and t are:

$$\frac{dt}{dz} = \frac{1}{\beta c}, \quad (2)$$

$$\frac{d\gamma}{dz} = \frac{eE_z(r, z, t)}{mc^2}, \quad (3)$$

where e, m – the charge and mass of the electron, $\beta = \sqrt{1 - 1/\gamma^2}$, z – axial coordinate, $emit_n$ - normalized emittance.

In the equation (1) E_z, E_r, H_ϕ are the components of wake field excited by drive bunch. They do not consider the influence of accelerating bunch on the excited wake field. The detail obtaining of these expressions was described in the paper [8]. Here they are:

$$E_z(r, z, t) = \begin{cases} -\frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \left[\frac{1}{r_b k_p} - \frac{I_0(k_p r)}{I_0(k_p a)} \Delta_1(k_p r_b, k_p a) \right] - \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_0(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, & r < r_b \\ -\frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \frac{I_1(k_p r)}{I_0(k_p a)} \Delta_0(k_p a, k_p r) - \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_0(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, & r_b \leq r < a \\ -\frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_0(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, & a \leq r < b \end{cases}, \quad (2)$$

$$E_r(r, z, t) = \begin{cases} \frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b^2} \frac{1}{I_0(k_p a)} \left[I_1(k_p r) \left[r \Delta_1(k_p r, k_p a) - r_b \Delta_1(k_p r_b, k_p a) \right] - \right. \\ \left. - \Delta_1(k_p a, k_p r) r I_1(k_p r) \right] + \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, r < r_b \\ \frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \frac{I_1(k_p r_b)}{I_0(k_p a)} \Delta_1(k_p a, k_p r) + \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, r_b < r < a \\ \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{1}{\sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_1(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, a < r < b \end{cases}, \quad (3)$$

$$H_\varphi(r, z, t) = \begin{cases} \frac{8Q\beta\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{\varepsilon_p(w_s)}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, 0 < r < a \\ \frac{8Q\beta\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{\varepsilon_d}{\sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_1(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, a < r < b \end{cases}, \quad (4)$$

where

$$\Theta_p = \left\{ \Theta \left(t - \frac{z}{v} \right) \sin w_p \left(t - \frac{z}{v} \right) - \Theta \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \sin w_p \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \right\}, \quad (5)$$

$$\Theta_s = \left\{ \Theta \left(t - \frac{z}{v} \right) \sin w_s \left(t - \frac{z}{v} \right) - \Theta \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \sin w_s \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \right\},$$

$$\begin{aligned} F_0(x, y) &= J_0(x)N_0(y) - N_0(x)J_0(y) \\ F_1(x, y) &= -J_1(x)N_0(y) + N_1(x)J_0(y) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Delta_0(x, y) &= I_0(x)K_0(y) - K_0(x)I_0(y) \\ \Delta_1(x, y) &= I_1(x)K_0(y) + K_1(x)I_0(y) \end{aligned} \quad (7)$$

$\Theta(\chi)$ - Heaviside function, $J_0(x), J_1(x), N_0(x), N_1(x)$ - Bessel and Neymann functions 1st and 2nd order respectively, v - velocity of bunch, $\varepsilon(w) = \varepsilon_p(w) = 1 - w_p^2 / w^2$, if $r < a$ and $\varepsilon(w) = \varepsilon_d$ if $a \leq r < b$; $w_p = \sqrt{4\pi e^2 n_p / m}$ - the plasma frequency, ε_d - the dielectric constant of the dielectric shell. $I_0(x), I_1(x), K_0(x), K_1(x)$ - modified Bessel and Macdonald functions zero and first order respectively. $k_p = w_p / v$, $\kappa_p^s = \kappa_p(w = w_s)$, $\kappa_d^s = \kappa_d(w = w_s)$, $D'(w_s) = \left. \frac{dD(w)}{dw} \right|_{w=w_s}$;

$$D(w) = \frac{\varepsilon_p(w)}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w)}} \frac{I_1(\kappa_p a)}{I_0(\kappa_p a)} + \gamma_d \frac{F_1(\kappa_d a, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, \quad (8)$$

where $\gamma_d = \varepsilon_d / \sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}$.

The eigen frequencies of the dielectric modes w_s are determined by solving the dispersion equation $D(w) = 0$.

TYPICAL DISTRIBUTION OF FORCES

In order to demonstrate the characteristic of distribution of forces, exerting on accelerated bunch in plasma-dielectric structure, we will give the results of numerical calculations. To conduct the numerical simulation was chosen dielectric waveguide gigahertz range. Parameters of charged particles bunches are taken in accordance with the experiments carried out in the Argonne Laboratory (Table).

The calculation results for the plasma density $n_p = 3 \cdot n_b = 7.455 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ are shown in Fig.2-Fig.3. In Fig. 2 axial distributions of the longitudinal and transverse forces are shown. They are exerting on a test particle spaced 2 mm from the axis of the waveguide i.e. at the boundary of the bunch. From comparing the dependencies, we can see that placing a test bunch at a distance 1.5 cm or 5.6 cm from the head of the leading bunch ensures the acceleration of charged particles with their simultaneous radial focusing. As shown in figure, radial force has nearly harmonic dependence on longitudinal coordinate with period ~ 4 cm. Langmuir wave makes a predominant contribution to the radial force. At the same time its contribution to the longitudinal strength, accelerating test particles, is predominantly small.

Longitudinal force is mainly determined by the dielectric waveguide eigen modes, its complicated dependence on the longitudinal coordinate related with the excitation of several radial modes of a dielectric waveguide.

Table

Parameters of plasma-dielectric accelerator used in calculations	
Outer radius of dielectric tube	5.11 mm
Inner radius of dielectric tube	4.0 mm
Dielectric constant ε : (fused silica)	3.75
Bunch length L_b	2.0 mm
Bunch radius r_b	2.0 mm
Plasma radius	4.0 mm
Bunch energy	14 MeV
Bunch charge	1 nC
Density of drive bunch	$2.485 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$

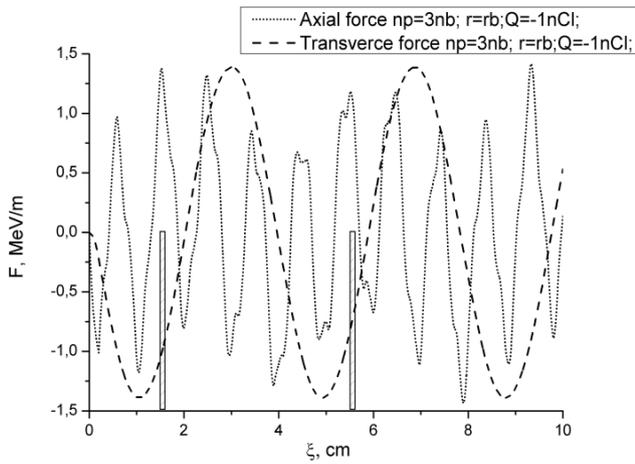


Fig. 2. Axial profile longitudinal (dotted line) and transverse force (dash line), exerting on a test particle, located at a distance 0.2 cm from waveguide axis. $\xi = v_0 t - z$, the head of the leading bunch is in $\xi = 0$.

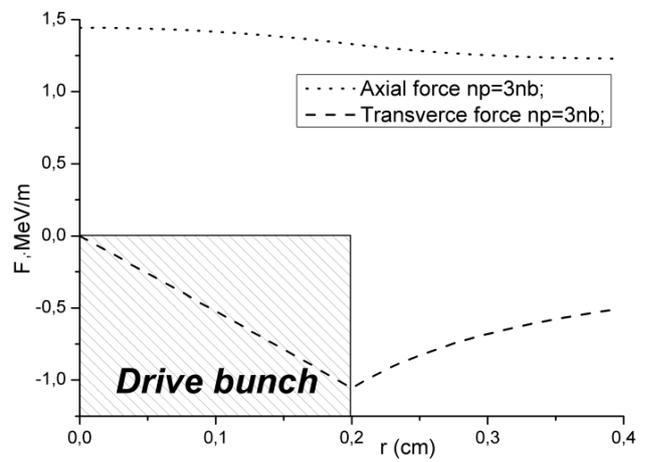


Fig. 3. Transverse profile longitudinal (dotted line) and transverse (dash line) forces, exerting on a test particle, located at a distance 1.5 cm from head of the leading bunch.

Radial dependence of the longitudinal and transverse forces, exerting on a test particle, located in the first accelerating field maxima, at the distance 1.5 cm behind the head of the leading bunch is shown in Fig. 3. Longitudinal force varies little in the transverse cross-section of the transport channel, and radial force is focusing on the entire cross-section of the channel.

RESULTS OF NUMERICAL MODELING

To model transverse dynamics charged particles bunches in plasma-dielectric wakefield accelerator the same parameters were used, as for demonstration of the typical distribution of forces in a given structure (Table 1).

Let's write the second order differential equation (1) as a system of two first order differential equations. In addition to the system of equations, differential equations (2) and (3), required for solving equation of the envelope.

$$\begin{cases}
 \frac{dr}{dz} = y \\
 \frac{dy}{dz} = -\frac{e\beta H_\phi(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \left(\frac{dr}{dz}\right)^2 - \frac{eE_z(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \frac{dr}{dz} + \frac{e(E_r(r, z, t) - \beta H_\phi(r, z, t))}{m\gamma\beta^2 c^2} + \frac{emit_n^2}{r^3 \beta^2 \gamma^2} \\
 \frac{dt}{dz} = \frac{1}{\beta c} \\
 \frac{d\gamma}{dz} = \frac{e}{mc^2} E_z(r, z, t)
 \end{cases} \quad (9)$$

The initial conditions for such a system will have the form $\left. \frac{dr}{dz} \right|_{z=0} = 0, r|_{z=0} = r_b, t|_{z=0} = t_0, \gamma|_{z=0} = \gamma_0$ (10), where r_b - radius of charged particles bunch, $t_0 = 1.5 / v_0$ - time of entry of the bunch, $v|_{z=0} = v_0$, $\gamma_0 = 1 / \sqrt{1 - \beta_0^2}$, $\beta_0 = v_0 / c$.

For the numerical solution of system of differential equations of the first order (11) we use the method of Runge-Kutta of fourth order. Results of modeling can be represented as a graph. The graph represents the so-called "bunch envelope". In Fig.4-7 bunch envelopes with different values of the initial emittance are given.

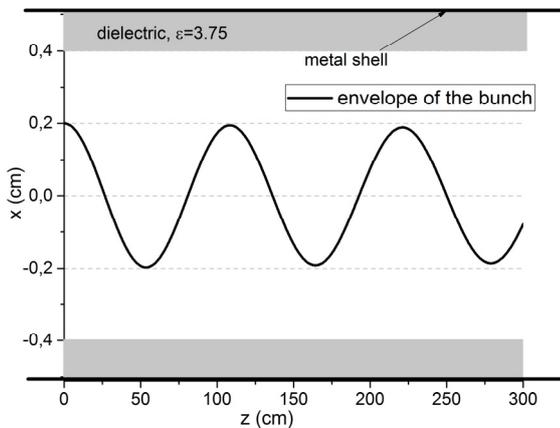


Fig. 4. The trajectory of the motion of the boundary bunch particle when $emit_n = 0$

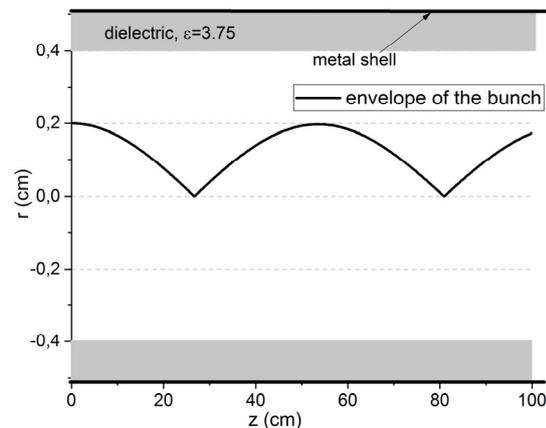


Fig. 5. The envelope of the bunch with emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$

Trajectory of the boundary bunch particles without initial emittance is shown in Fig.4. It is well seen, that under the influence of focusing force the bunch shrinks, then there is «flipping over» and the bunch is expanded back. Focusing force exerts symmetrically, so particle flow in the "lower" part of the bunch get radial breaking and is focused to axis again. X coordinate in the positive area is the radius of the bunch. In the negative area under the radius of the bunch is meant the absolute value of X. The sign "-" indicates that the boundary particle moved to another part of the bunch relative to the axis. The envelope of the same bunch, but with the finite initial emittance is shown in Fig.5. The envelope of the bunch is always in the positive area. Since real bunches always have the initial emittance, we can make conclusion, that the bunch is never inverted relative to its axis.

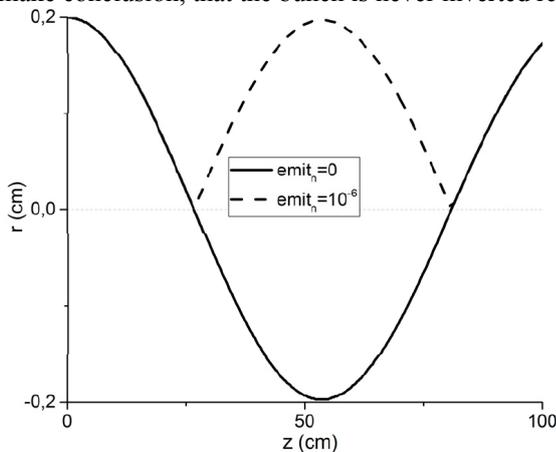


Fig. 6. Envelopes of bunches when emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dash line and –solid line if $emit_n = 0$ respectively.

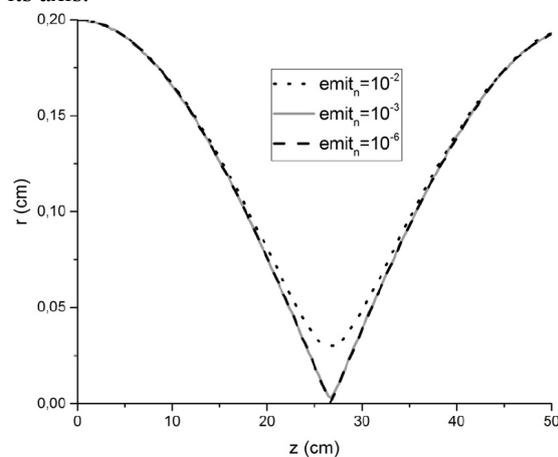


Fig. 7. Envelopes of bunches when emittance $emit_n = 10^{-2} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dotted line, $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – solid line and $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dash line.

Trajectories of the boundary bunch particles excluding emittance and with small emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ are shown in Fig.6. The trajectory of the particle in the presence of small emittance is exactly a copy of the particle's trajectory without emittance; in condition of bunch reaching to the axis this particle is reflected.

Trajectories of motion of the boundary bunch particles with three different initial values of emittance are shown in Fig.7. From Fig.7 we can see, that with emittance $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ ((green solid line) particle is not able to reach bunch axis, so bunch is not split up into a series of spherical bunches. When emittance $emit_n = 10^{-2} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ it is already well visible, that the presence of initial emittance does not allow bunch to shrink to the point or «flipped over».

Envelopes of bunch at different values of the initial emittance are shown in Fig.8. Transverse dynamics of bunches by increasing the initial value of the emittance is well visible. As follows from Fig.8, at the value of normalized initial emittance $emit_n = 3 \cdot 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ (line 6) it is possible to focus the electron bunch (its diameter is halved). If accelerated bunch has worse quality, it cannot be possible to do good focusing in the accelerator with parameters shown in the

Table 1. During the numerical simulation it was also found, that the amplitude of radial oscillations of the boundary particles of bunch damps with time. With an increase of emittance the rate of damping is also increases. It is well seen in Fig.9 that over time the amplitude of motion of the particles is decreases. This is related with acceleration of the particles by wakefield. To analyze this let's look at equation (1). If witness bunch is in accelerating phase - γ is increasing. The terms that have in the denominator γ - decreases. In the summand which describe emittance - γ included in the minus second degree. In the summand, which describe emittance - γ included in the minus second degree. Initial emittance included in the numerator, so the larger the emittance is - the more noticeable this effect is.

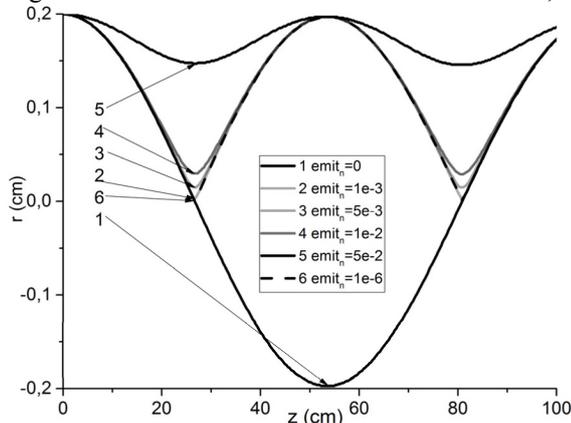


Fig. 8. Envelopes of bunches with different emittance.

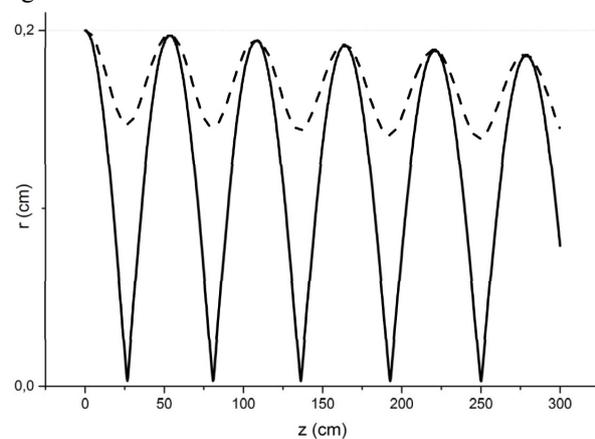


Fig. 9. Envelopes of bunches with emittances $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ - solid line, $emit_n = 5 \cdot 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ - dash line.

Let's confirm the above by the analytical estimate. Summand with the radial electric field of plasma wave and summand with the emittance gave the main contribution in the equation of the envelope (1) of relativistic electron bunch. Neglecting the other terms and assuming fulfillment of the condition $\omega_p r / c \ll 1$, the equation of the envelope reduces to the form:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} \approx -\frac{Kr}{\gamma} + \frac{emit_n^2}{r^3 \gamma^2}, \quad (11)$$

where K - focusing parameter, which depend from structure parameters and drive bunch charge. Envelope of bunch oscillate around equilibrium radius. The expression for the equilibrium radius r_0 of envelope is:

$$r_0 = \left(\frac{emit_n^2}{K\gamma} \right)^{1/4}. \quad (12)$$

With an increase of normalized initial emittance an equilibrium radius of bunch is also increases, that is confirmed by dependences shown in Fig.8. In addition, as it follows from (14), with an increase of bunch energy an equilibrium radius decreases. The damped dependences of the envelope during the acceleration process, given in Fig.9, distinctly demonstrate it. In order to find the value of normalized initial emittance for which effective radial focusing is possible, expression (14) could be rewritten in the another form:

$$emit_n = \frac{1}{4} r_b^2 (K\gamma)^{1/2}, \quad (13)$$

where the value of an equilibrium radius r_0 of the accelerating bunch was taken equal to half of its starting radius r_b . From expression (15) can be well seen that with the increases of the accelerating bunch energy or drive bunch charge, requirements to quality (initial emittance) of accelerating bunch, for its significant compression, decreases.

CONCLUSIONS

In this paper the dependence of the transverse dynamics of charged particles bunches on the initial emittance was investigated. Emittance limiting values for which the transverse dynamics of charged particles bunches remains stable were founded. The transition from a pinch to stable dynamics was shown. It has been found that the amplitude of movement of the boundary bunch particles decreases with time. Amplitude of the bunch's border movement decreases with the increasing of the initial value of the emittance. This effect is more noticeable for the larger emittance.

Invaluable assistance in the preparation of this work was provided by G.V.Sotnikov, P.I.Markov, A.P. Tolstoluzskiy.

Work supported in part by NAS of Ukraine program "Perspective investigations on plasma physics, controlled thermonuclear fusion and plasma technologies", Project P-1/63-2015 "Development of physical principles of plasma-dielectric wakefield accelerator".

REFERENCES

1. Schiltzev V.D. High-energy particle colliders: past 20 years, next 20 years, and beyond // *Phys.-Usp.* - 2015. - Vol. 58. - No.1.- P.81-88.
2. Wei G. Advanced accelerating structures and their interaction with electron beams // *AIP Conf. Proc.* No. 1086 (AIP, New York, 2009). - P.3-11.
3. Kostjukov I.Y., Pukhov A.M. Plasma-based methods for electron acceleration: current status and prospects // *Phys.-Usp.* - 2015. - Vol. 58. - No.1. - P.81-88.
4. Chen P.P., Dowson J.M., Huff R.W. et al. Acceleration of Electrons by the Interaction of a Bunched Electron Beam with a Plasma // *Phys.Rev.Lett.* - 1985. - Vol.54. - P.93.
5. Hogan M.J., Barnes C.D., Clayton C.E. et.al. Multi-GeV Energy Gain in a Plasma wake field accelerator // *Phys. Rev. Lett.* - 2005. - Vol.95. - No.5. - P.054802.
6. Berezin A.K., Zemlyansky N.M., Mirniy V.I. et al. Theoretical studies of wakefield excitation in a plasma-dielectric structures // *Ukr. Phys. Journal.* - 1992. - Vol.37. - No. 7. - P.999-1002.
7. Balakirev V.A. et al. Excitation of wake fields by relativistic electron bunches in a plasma with radial density variation // *Plasma Physics Reports.* - 1997. - Vol.23. - No.4. - P.290-298.
8. Kniaziev R.R., Sotnikov G.V. Focusing of electron bunches wake fields in a plasma-dielectric waveguide // *The Journal of Kharkiv National University. Physical series «Nuclei, Particles, Fields».* - 2012. - Vol. 1001. - No. 2(54). - P.64-68.
9. Kniaziev R.R., Manuilenko O.V., Markov P.I., Marshall T.C., Onishchenko I.N., Sotnikov G.V. "Focusing of electron and positron bunches in plasma-dielectric wakefield accelerators" *PROBLEMS OF ATOMIC SCIENCE AND TECHNOLOGY (PAST).* - 2013. - No. 4(86). - P.84-89
10. Kniaziev R.R., Manuilenko O.V., Markov P.I., Marshall T.C., Onishchenko I.N., Sotnikov G.V. "Analytical and numerical studies of underdense and overdense regimes in plasma-dielectric wakefield accelerators" *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A.*
11. Kniaziev R.R., Sotnikov G.V. Quasistatic field influence on bunches focusing by wakefields in the plasma-dielectric waveguide <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/IPAC2013/papers/tupea055.pdf>
12. Lawson J.D. *The physics of charged-particle beams* / *The International Series of Monographs on Physics.* - Oxford: Clarendon Press, 1977.

PACS: 41.75.Ht, 41.75.Lx, 41.75.Jv, 96.50.Pw, 533.9.

INFLUENCE OF EMITTANCE ON TRANSVERSE DYNAMICS OF THE ACCELERATED BUNCHES IN PLASMA-DIELECTRIC WAKE FIELD ACCELERATOR

R.R. Kniaziev

V.N. Karazin Kharkiv National University

Kharkiv, Svobody sq.4, 61022

e-mail: rkniaziev@gmail.com

Received 19 June, 2015

In this paper transverse dynamics of charged bunch particles in plasma-dielectric wake field accelerator on an example of a gigahertz range dielectric waveguide is researched, bunch parameters correspond to bunches obtainable at Argonne National Laboratory. Analytical expressions for calculating wakefields and equations for modeling bunch particle motion are provided. The behavior of the boundary bunch particle for different values of the initial emittance was modeled. It was shown, that the amplitude of motion of the boundary bunch particles changes on time.

KEYWORDS: acceleration, focusing, wake field, bunches, dielectric waveguide, plasma, emittance

ВЛИЯНИЕ ЭМИТТАНСА НА ПОПЕРЕЧНУЮ ДИНАМИКУ УСКОРЯЕМЫХ СГУСТКОВ В ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ КИЛЬВАТЕРНОМ УСКОРИТЕЛЕ

Р.Р. Князев

ХНУ им. В.Н. Каразина

г. Харьков, пл. Свободы, 4, 61022

В работе исследуется поперечная динамика заряженных частиц пучка в плазменно-диэлектрическом кильватерном ускорителе на примере диэлектрического волновода гигагерцового диапазона, параметры пучков соответствуют пучкам, получаемым в Аргонской лаборатории. Приведены аналитические выражения для расчета кильватерных полей и уравнения для моделирования движения частиц сгустка. Промоделировано поведение краевой частицы пучка при разных значениях начального эмиттанса. Получены зависимости для огибающих пучка для разных значений начального эмиттанса. Показано что амплитуда движения краевых частиц пучка изменяется со временем.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ускорение, фокусировка, кильватерные поля, пучки, диэлектрический волновод, плазма, эмиттанс

ВПЛИВ ЕМИТТАНСА НА ПОПЕРЕЧНУ ДИНАМІКУ ПРИСКОРЮВАНИХ ЗГУСТКІВ В ПЛАЗМОВО-ДИЕЛЕКТРИЧНОМУ КІЛЬВАТЕРНОМУ ПРИСКОРЮВАЧІ

Р.Р. Князев

ХНУ ім. В.Н. Каразіна

м. Харків, пл. Свободи, 4, 61022

В роботі досліджується поперечна динаміка заряджених частинок згустку в плазмово-діелектричному кильватерному прискорювачі на прикладі діелектричного хвилеводу гігагерцового діапазону, параметри згустків відповідають згусткам, які отримуються в Аргонській лабораторії. Подано аналітичні вирази для розрахунку кильватерного поля та рівняння для моделювання руху частинок згустку. Промодельована поведінка граничної частинки згустку при різних значеннях початкового еміттансу. Отримані залежності для оминаючих згустку при різних значеннях початкового еміттансу. Показано що амплітуда руху граничних частинок згустку має залежність від часу.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: прискорення, фокусування, кильватерні поля, згустки, діелектричний хвилевод, плазма, еміттанс

Accelerator physics is actual, thriving branch of modern physics. One of the new methods of acceleration, that allows significantly reducing weight and sizing characteristics of accelerators, is method of accelerating charged particles by wakefields [1,2]. An important characteristic of any accelerator is luminosity of the accelerated bunch, which is determined by the density of the bunch and its phase volume. The final phase volume is determined by the transverse dynamics of the particles, so knowing it, we can judge about transverse stability and final phase volume of accelerated bunch. In this paper transverse dynamics of charged bunch particles in plasma-dielectric wakefield accelerator on an example of a gigahertz range dielectric waveguide is researched. Parameters of charged particles bunches are taken in accordance with the experiments carried out in the Argonne Laboratory. Excitation of electromagnetic fields by concentrated sources in the hybrid plasma-dielectric structure allows increasing the rate of acceleration. This provides simultaneous radial-phase focusing. Compared with pure plasma variant [3-5], hybrid plasma-dielectric structures [6] provide greater wave stability and are less sensitive to the temporal and spatial changes of the plasma density [7]. The goal of this work: study the behavior of accelerated charged particles bunch in plasma-dielectric wake field accelerator, to analyze the transverse dynamics of bunch in PDWA with different values of the initial emittance of bunch.

STATEMENT OF THE PROBLEM

Consider a structure that is infinitely long waveguide with an annular dielectric shell (look figure Fig.1). The dielectric constant of this shell is ϵ . Inside the dielectric shell (in the transit channel) there is plasma with density n_p . Along the axis of the waveguide drive bunch moves, which excites the wake field [8]. After some time, collinear to

drive bunch, accelerated bunch is injected. Delay time is selected so accelerated bunch was simultaneously at maximum of accelerating field.

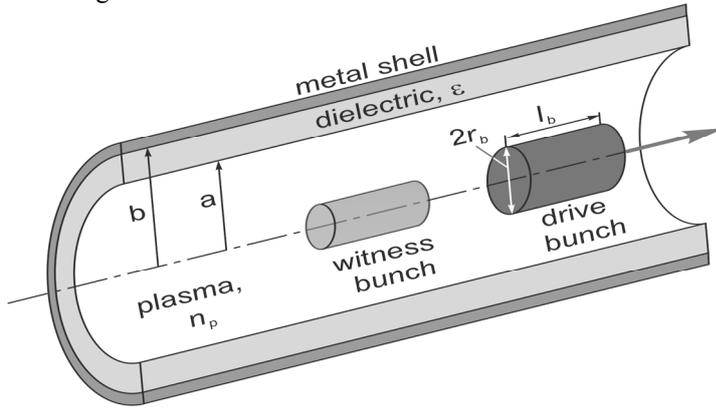


Fig. 1. Geometry of structure.

a – the inner radius of the dielectric shell; b – the outer radius of the dielectric shell; n_p – plasma density; r_b – bunch radius; l_b – bunch length; ε - dielectric constant.

In works [8,9] possibility of simultaneous radial focusing and longitudinal acceleration of charged particles bunch in such structure was shown. The appearance of the focusing force is due to the excitation of plasma (Langmuir) waves. Langmuir wave, in some plasma densities, makes a predominant contribution to the transverse force that exerts on accelerated bunch. At the same time, the contribution of plasma waves in the longitudinal force is negligible. Longitudinal force is mainly determined by the wave corresponding to the eigen modes of a dielectric [10].

Therefore, plasma in the transit channel is responsible for the focusing force, and dielectric shell – for accelerated force. With some density of the plasma, longitudinal field of the Langmuir wave significantly less than the total longitudinal field of dielectric

modes. However, the radial electric field of the Langmuir wave still far exceeds the total transverse field of dielectric modes. These two types of waves – Langmuir and dielectric – generally have different spatial periods; therefore, the maximum of total longitudinal field can correspond to a minimum of a full transverse field. Thereby, when placing a test bunch in the maximum of dielectric wave accelerating field we can simultaneously focus it by Langmuir wave's field.

While solving the problem of focusing the accelerated bunch we must not forget that there is also a defocusing force. The main causes of defocusing forces are Coulomb field and the initial emittance of the bunch. It was shown [11], that the influence of the Coulomb field on the focusing of charged particles bunches in the plasma-dielectric structures with the density of the plasma and bunch charges, with which we work, is negligible. We assume that terms describing the quasi-static component of wake field are equal to zero. This will greatly simplify the expression, describing electromagnetic fields, excited by driver bunch in plasma dielectric accelerator.

BASIC EQUATION

The nature of the transverse motion of the particles is determined by solution of the equation of the envelope [12]:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} + \frac{e\beta H_\phi(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \left(\frac{dr}{dz}\right)^2 + \frac{eE_z(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \frac{dr}{dz} - \frac{e(E_r(r, z, t) - \beta H_\phi(r, z, t))}{m\gamma\beta^2 c^2} - \frac{emit_n^2}{r^3 \beta^2 \gamma^2} = 0. \quad (1)$$

To solve the equation (1) we must specify γ and t . The equations describing γ and t are:

$$\frac{dt}{dz} = \frac{1}{\beta c}, \quad (2)$$

$$\frac{d\gamma}{dz} = \frac{eE_z(r, z, t)}{mc^2}, \quad (3)$$

where e, m – the charge and mass of the electron, $\beta = \sqrt{1 - 1/\gamma^2}$, z – axial coordinate, $emit_n$ - normalized emittance.

In the equation (1) E_z, E_r, H_ϕ are the components of wake field excited by drive bunch. They do not consider the influence of accelerating bunch on the excited wake field. The detail obtaining of these expressions was described in the paper [8]. Here they are:

$$E_z(r, z, t) = \begin{cases} -\frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \left[\frac{1}{r_b k_p} - \frac{I_0(k_p r)}{I_0(k_p a)} \Delta_1(k_p r_b, k_p a) \right] - \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_0(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, & r < r_b \\ -\frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \frac{I_1(k_p r)}{I_0(k_p a)} \Delta_0(k_p a, k_p r) - \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_0(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, & r_b \leq r < a \\ -\frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_0(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, & a \leq r < b \end{cases}, \quad (2)$$

$$E_r(r, z, t) = \begin{cases} \frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b^2} \frac{1}{I_0(k_p a)} \left[I_1(k_p r) \left[r \Delta_1(k_p r, k_p a) - r_b \Delta_1(k_p r_b, k_p a) \right] - \right. \\ \left. - \Delta_1(k_p a, k_p r) r I_1(k_p r) \right] + \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, r < r_b \\ \frac{4Q\Theta_p}{L_b r_b} \frac{I_1(k_p r_b)}{I_0(k_p a)} \Delta_1(k_p a, k_p r) + \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, r_b < r < a \\ \frac{8Q\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{1}{\sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_1(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, a < r < b \end{cases}, \quad (3)$$

$$H_\varphi(r, z, t) = \begin{cases} \frac{8Q\beta\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{\varepsilon_p(w_s)}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w_s)}} \frac{I_1(\kappa_p r)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)}, 0 < r < a \\ \frac{8Q\beta\Theta_s}{a L_b r_b w_s \kappa_p D'(w_s)} \frac{\varepsilon_d}{\sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}} \frac{I_1(\kappa_p r_b)}{I_0(\kappa_p a)} \frac{F_1(\kappa_d r, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, a < r < b \end{cases}, \quad (4)$$

where

$$\Theta_p = \left\{ \Theta \left(t - \frac{z}{v} \right) \sin w_p \left(t - \frac{z}{v} \right) - \Theta \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \sin w_p \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \right\}, \quad (5)$$

$$\Theta_s = \left\{ \Theta \left(t - \frac{z}{v} \right) \sin w_s \left(t - \frac{z}{v} \right) - \Theta \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \sin w_s \left(t - \frac{z}{v} - \frac{L_b}{v} \right) \right\},$$

$$\begin{aligned} F_0(x, y) &= J_0(x)N_0(y) - N_0(x)J_0(y) \\ F_1(x, y) &= -J_1(x)N_0(y) + N_1(x)J_0(y) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Delta_0(x, y) &= I_0(x)K_0(y) - K_0(x)I_0(y) \\ \Delta_1(x, y) &= I_1(x)K_0(y) + K_1(x)I_0(y) \end{aligned} \quad (7)$$

$\Theta(\chi)$ - Heaviside function, $J_0(x), J_1(x), N_0(x), N_1(x)$ - Bessel and Neymann functions 1st and 2nd order respectively, v - velocity of bunch, $\varepsilon(w) = \varepsilon_p(w) = 1 - w_p^2 / w^2$, if $r < a$ and $\varepsilon(w) = \varepsilon_d$ if $a \leq r < b$; $w_p = \sqrt{4\pi e^2 n_p / m}$ - the plasma frequency, ε_d - the dielectric constant of the dielectric shell. $I_0(x), I_1(x), K_0(x), K_1(x)$ - modified Bessel and Macdonald functions zero and first order respectively. $k_p = w_p / v$, $\kappa_p^s = \kappa_p(w = w_s)$, $\kappa_d^s = \kappa_d(w = w_s)$, $D'(w_s) = \left. \frac{dD(w)}{dw} \right|_{w=w_s}$;

$$D(w) = \frac{\varepsilon_p(w)}{\sqrt{1 - \beta^2 \varepsilon_p(w)}} \frac{I_1(\kappa_p a)}{I_0(\kappa_p a)} + \gamma_d \frac{F_1(\kappa_d a, \kappa_d b)}{F_0(\kappa_d a, \kappa_d b)}, \quad (8)$$

where $\gamma_d = \varepsilon_d / \sqrt{\beta^2 \varepsilon_d - 1}$.

The eigen frequencies of the dielectric modes w_s are determined by solving the dispersion equation $D(w) = 0$.

TYPICAL DISTRIBUTION OF FORCES

In order to demonstrate the characteristic of distribution of forces, exerting on accelerated bunch in plasma-dielectric structure, we will give the results of numerical calculations. To conduct the numerical simulation was chosen dielectric waveguide gigahertz range. Parameters of charged particles bunches are taken in accordance with the experiments carried out in the Argonne Laboratory (Table).

The calculation results for the plasma density $n_p = 3 \cdot n_b = 7.455 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ are shown in Fig.2-Fig.3. In Fig. 2 axial distributions of the longitudinal and transverse forces are shown. They are exerting on a test particle spaced 2 mm from the axis of the waveguide i.e. at the boundary of the bunch. From comparing the dependencies, we can see that placing a test bunch at a distance 1.5 cm or 5.6 cm from the head of the leading bunch ensures the acceleration of charged particles with their simultaneous radial focusing. As shown in figure, radial force has nearly harmonic dependence on longitudinal coordinate with period ~ 4 cm. Langmuir wave makes a predominant contribution to the radial force. At the same time its contribution to the longitudinal strength, accelerating test particles, is predominantly small.

Longitudinal force is mainly determined by the dielectric waveguide eigen modes, its complicated dependence on the longitudinal coordinate related with the excitation of several radial modes of a dielectric waveguide.

Table

Parameters of plasma-dielectric accelerator used in calculations	
Outer radius of dielectric tube	5.11 mm
Inner radius of dielectric tube	4.0 mm
Dielectric constant ε : (fused silica)	3.75
Bunch length L_b	2.0 mm
Bunch radius r_b	2.0 mm
Plasma radius	4.0 mm
Bunch energy	14 MeV
Bunch charge	1 nC
Density of drive bunch	$2.485 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$

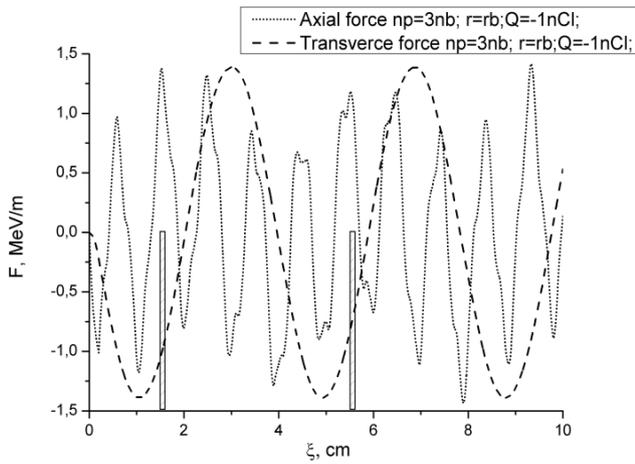


Fig. 2. Axial profile longitudinal (dotted line) and transverse force (dash line), exerting on a test particle, located at a distance 0.2 cm from waveguide axis. $\xi = v_0 t - z$, the head of the leading bunch is in $\xi = 0$.

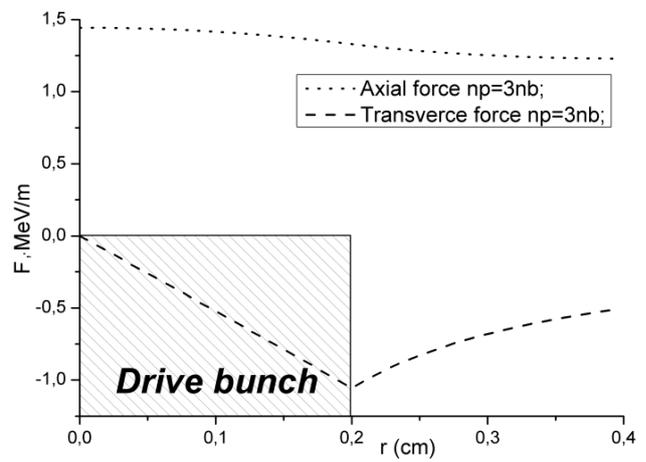


Fig. 3. Transverse profile longitudinal (dotted line) and transverse (dash line) forces, exerting on a test particle, located at a distance 1.5 cm from head of the leading bunch.

Radial dependence of the longitudinal and transverse forces, exerting on a test particle, located in the first accelerating field maxima, at the distance 1.5 cm behind the head of the leading bunch is shown in Fig. 3. Longitudinal force varies little in the transverse cross-section of the transport channel, and radial force is focusing on the entire cross-section of the channel.

RESULTS OF NUMERICAL MODELING

To model transverse dynamics charged particles bunches in plasma-dielectric wakefield accelerator the same parameters were used, as for demonstration of the typical distribution of forces in a given structure (Table 1).

Let's write the second order differential equation (1) as a system of two first order differential equations. In addition to the system of equations, differential equations (2) and (3), required for solving equation of the envelope.

$$\begin{cases}
 \frac{dr}{dz} = y \\
 \frac{dy}{dz} = -\frac{e\beta H_\phi(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \left(\frac{dr}{dz}\right)^2 - \frac{eE_z(r, z, t)}{m\gamma\beta^2 c^2} \frac{dr}{dz} + \frac{e(E_r(r, z, t) - \beta H_\phi(r, z, t))}{m\gamma\beta^2 c^2} + \frac{emit_n^2}{r^3 \beta^2 \gamma^2} \\
 \frac{dt}{dz} = \frac{1}{\beta c} \\
 \frac{d\gamma}{dz} = \frac{e}{mc^2} E_z(r, z, t)
 \end{cases} \quad (9)$$

The initial conditions for such a system will have the form $\left. \frac{dr}{dz} \right|_{z=0} = 0, r|_{z=0} = r_b, t|_{z=0} = t_0, \gamma|_{z=0} = \gamma_0$ (10), where r_b - radius of charged particles bunch, $t_0 = 1.5 / v_0$ - time of entry of the bunch, $v|_{z=0} = v_0$, $\gamma_0 = 1 / \sqrt{1 - \beta_0^2}$, $\beta_0 = v_0 / c$.

For the numerical solution of system of differential equations of the first order (11) we use the method of Runge-Kutta of fourth order. Results of modeling can be represented as a graph. The graph represents the so-called "bunch envelope". In Fig.4-7 bunch envelopes with different values of the initial emittance are given.

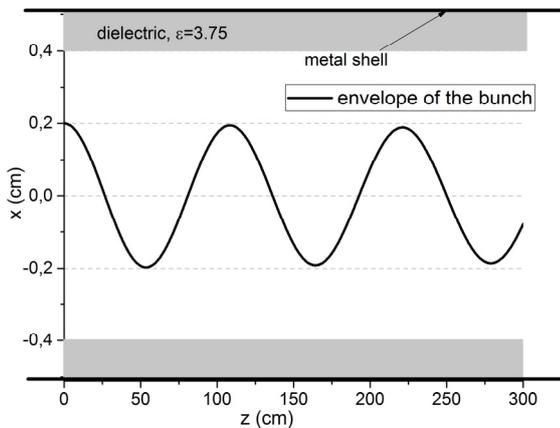


Fig. 4. The trajectory of the motion of the boundary bunch particle when $emit_n = 0$

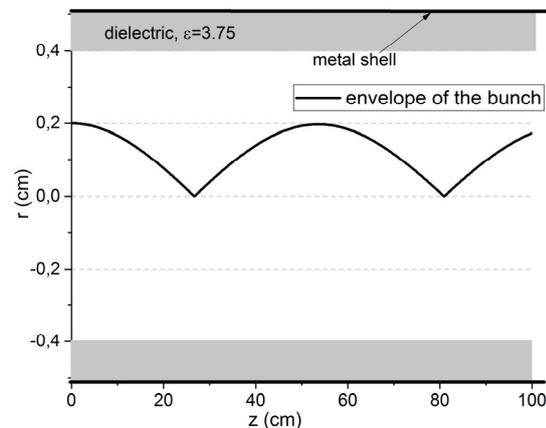


Fig. 5. The envelope of the bunch with emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$

Trajectory of the boundary bunch particles without initial emittance is shown in Fig.4. It is well seen, that under the influence of focusing force the bunch shrinks, then there is «flipping over» and the bunch is expanded back. Focusing force exerts symmetrically, so particle flow in the "lower" part of the bunch get radial breaking and is focused to axis again. X coordinate in the positive area is the radius of the bunch. In the negative area under the radius of the bunch is meant the absolute value of X. The sign "-" indicates that the boundary particle moved to another part of the bunch relative to the axis. The envelope of the same bunch, but with the finite initial emittance is shown in Fig.5. The envelope of the bunch is always in the positive area. Since real bunches always have the initial emittance, we can make conclusion, that the bunch is never inverted relative to its axis.

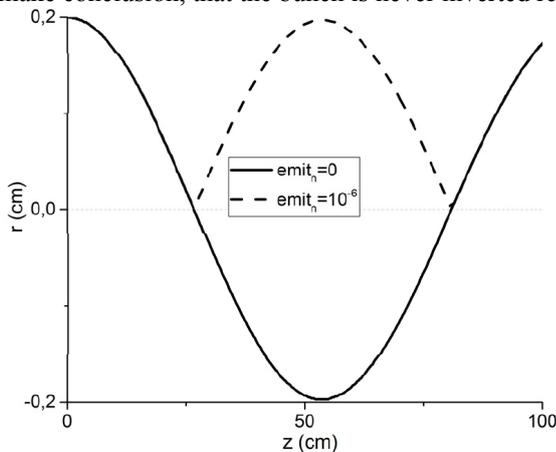


Fig. 6. Envelopes of bunches when emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dash line and –solid line if $emit_n = 0$ respectively.

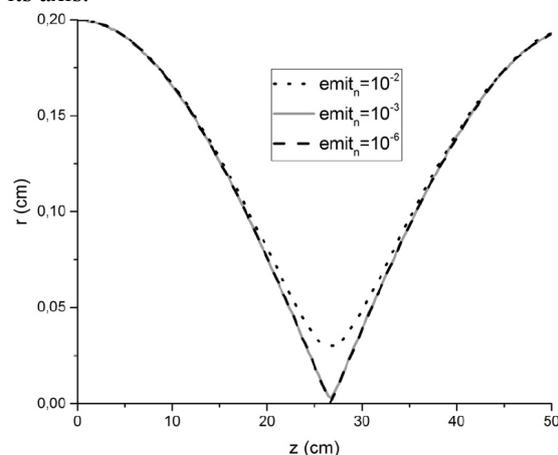


Fig. 7. Envelopes of bunches when emittance $emit_n = 10^{-2} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dotted line, $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – solid line and $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ – dash line.

Trajectories of the boundary bunch particles excluding emittance and with small emittance $emit_n = 10^{-6} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ are shown in Fig.6. The trajectory of the particle in the presence of small emittance is exactly a copy of the particle's trajectory without emittance; in condition of bunch reaching to the axis this particle is reflected.

Trajectories of motion of the boundary bunch particles with three different initial values of emittance are shown in Fig.7. From Fig.7 we can see, that with emittance $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ ((green solid line) particle is not able to reach bunch axis, so bunch is not split up into a series of spherical bunches. When emittance $emit_n = 10^{-2} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ it is already well visible, that the presence of initial emittance does not allow bunch to shrink to the point or «flipped over».

Envelopes of bunch at different values of the initial emittance are shown in Fig.8. Transverse dynamics of bunches by increasing the initial value of the emittance is well visible. As follows from Fig.8, at the value of normalized initial emittance $emit_n = 3 \cdot 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ (line 6) it is possible to focus the electron bunch (its diameter is halved). If accelerated bunch has worse quality, it cannot be possible to do good focusing in the accelerator with parameters shown in the

Table 1. During the numerical simulation it was also found, that the amplitude of radial oscillations of the boundary particles of bunch damps with time. With an increase of emittance the rate of damping is also increases. It is well seen in Fig.9 that over time the amplitude of motion of the particles is decreases. This is related with acceleration of the particles by wakefield. To analyze this let's look at equation (1). If witness bunch is in accelerating phase - γ is increasing. The terms that have in the denominator γ - decreases. In the summand which describe emittance - γ included in the minus second degree. In the summand, which describe emittance - γ included in the minus second degree. Initial emittance included in the numerator, so the larger the emittance is - the more noticeable this effect is.

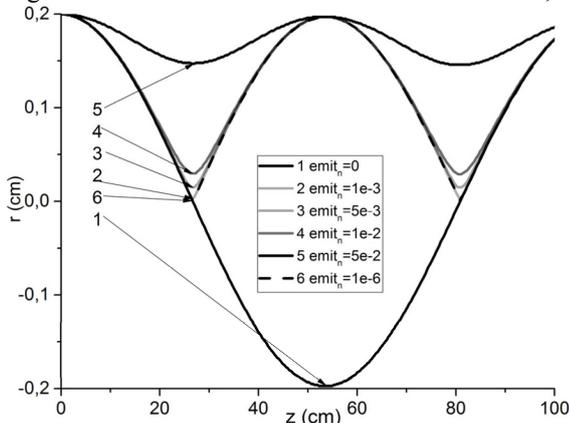


Fig. 8. Envelopes of bunches with different emittance.

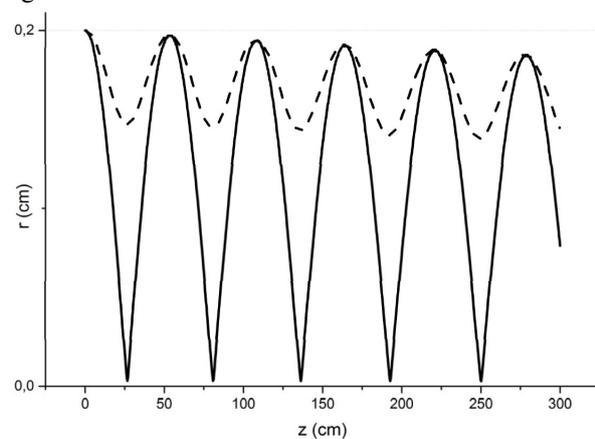


Fig. 9. Envelopes of bunches with emittances $emit_n = 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ - solid line, $emit_n = 5 \cdot 10^{-3} \text{ cm} \cdot \text{rad}$ - dash line.

Let's confirm the above by the analytical estimate. Summand with the radial electric field of plasma wave and summand with the emittance gave the main contribution in the equation of the envelope (1) of relativistic electron bunch. Neglecting the other terms and assuming fulfillment of the condition $\omega_p r / c \ll 1$, the equation of the envelope reduces to the form:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} \approx -\frac{Kr}{\gamma} + \frac{emit_n^2}{r^3 \gamma^2}, \quad (11)$$

where K - focusing parameter, which depend from structure parameters and drive bunch charge. Envelope of bunch oscillate around equilibrium radius. The expression for the equilibrium radius r_0 of envelope is:

$$r_0 = \left(\frac{emit_n^2}{K\gamma} \right)^{1/4}. \quad (12)$$

With an increase of normalized initial emittance an equilibrium radius of bunch is also increases, that is confirmed by dependences shown in Fig.8. In addition, as it follows from (14), with an increase of bunch energy an equilibrium radius decreases. The damped dependences of the envelope during the acceleration process, given in Fig.9, distinctly demonstrate it. In order to find the value of normalized initial emittance for which effective radial focusing is possible, expression (14) could be rewritten in the another form:

$$emit_n = \frac{1}{4} r_b^2 (K\gamma)^{1/2}, \quad (13)$$

where the value of an equilibrium radius r_0 of the accelerating bunch was taken equal to half of its starting radius r_b . From expression (15) can be well seen that with the increases of the accelerating bunch energy or drive bunch charge, requirements to quality (initial emittance) of accelerating bunch, for its significant compression, decreases.

CONCLUSIONS

In this paper the dependence of the transverse dynamics of charged particles bunches on the initial emittance was investigated. Emittance limiting values for which the transverse dynamics of charged particles bunches remains stable were founded. The transition from a pinch to stable dynamics was shown. It has been found that the amplitude of movement of the boundary bunch particles decreases with time. Amplitude of the bunch's border movement decreases with the increasing of the initial value of the emittance. This effect is more noticeable for the larger emittance.

Invaluable assistance in the preparation of this work was provided by G.V.Sotnikov, P.I.Markov, A.P. Tolstoluzskiy.

Work supported in part by NAS of Ukraine program "Perspective investigations on plasma physics, controlled thermonuclear fusion and plasma technologies", Project P-1/63-2015 "Development of physical principles of plasma-dielectric wakefield accelerator".

REFERENCES

1. Schiltzev V.D. High-energy particle colliders: past 20 years, next 20 years, and beyond // *Phys.-Usp.* - 2015. - Vol. 58. - No.1.- P.81-88.
2. Wei G. Advanced accelerating structures and their interaction with electron beams // *AIP Conf. Proc.* No. 1086 (AIP, New York, 2009). - P.3-11.
3. Kostjukov I.Y., Pukhov A.M. Plasma-based methods for electron acceleration: current status and prospects // *Phys.-Usp.* - 2015. - Vol. 58. - No.1. - P.81-88.
4. Chen P.P., Dowson J.M., Huff R.W. et al. Acceleration of Electrons by the Interaction of a Bunched Electron Beam with a Plasma // *Phys.Rev.Lett.* - 1985. - Vol.54. - P.93.
5. Hogan M.J., Barnes C.D., Clayton C.E. et.al. Multi-GeV Energy Gain in a Plasma wake field accelerator // *Phys. Rev. Lett.* - 2005. - Vol.95. - No.5. - P.054802.
6. Berezin A.K., Zemlyansky N.M., Mirniy V.I. et al. Theoretical studies of wakefield excitation in a plasma-dielectric structures // *Ukr. Phys. Journal.* - 1992. - Vol.37. - No. 7. - P.999-1002.
7. Balakirev V.A. et al. Excitation of wake fields by relativistic electron bunches in a plasma with radial density variation // *Plasma Physics Reports.* - 1997. - Vol.23. - No.4. - P.290-298.
8. Kniaziev R.R., Sotnikov G.V. Focusing of electron bunches wake fields in a plasma-dielectric waveguide // *The Journal of Kharkiv National University. Physical series «Nuclei, Particles, Fields».* - 2012. - Vol. 1001. - No. 2(54). - P.64-68.
9. Kniaziev R.R., Manuilenko O.V., Markov P.I., Marshall T.C., Onishchenko I.N., Sotnikov G.V. "Focusing of electron and positron bunches in plasma-dielectric wakefield accelerators" *PROBLEMS OF ATOMIC SCIENCE AND TECHNOLOGY (PAST).* - 2013. - No. 4(86). - P.84-89
10. Kniaziev R.R., Manuilenko O.V., Markov P.I., Marshall T.C., Onishchenko I.N., Sotnikov G.V. "Analytical and numerical studies of underdense and overdense regimes in plasma-dielectric wakefield accelerators" *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A.*
11. Kniaziev R.R., Sotnikov G.V. Quasistatic field influence on bunches focusing by wakefields in the plasma-dielectric waveguide <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/IPAC2013/papers/tupea055.pdf>
12. Lawson J.D. *The physics of charged-particle beams* / The International Series of Monographs on Physics. - Oxford: Clarendon Press, 1977.

PACS: 87.14.Cc, 87.16.Dg

MODELING OF AMYLOID FIBRIL BINDING TO THE LIPID BILAYER**V. Trusova***Department of Nuclear and Medical Physics, V.N. Karazin Kharkov National University**4 Svobody Sq., Kharkov, 61022, Ukraine**e-mail: valtrusova@yahoo.com*

Received June 9, 2015

Using the different computational approaches, we constructed the core region of amyloid fibrils from lysozyme, A β -protein and apolipoprotein A-I, and studied the adsorption of fibrillar aggregates onto lipid bilayer surface. The structures of amyloids differing in their twisting angle were generated with CreateFibril software. The stability of the obtained assemblies was assessed by means of AQUASOL tool, and the twisting angle providing the most stable conformation was identified. The energetically favorable orientation of the fibrils within the lipid membranes was predicted based on PPM server. It was found that increasing amyloid periodicity bring about the rise in free energy of peptide transfer from aqueous to membrane phase.

KEYWORDS: amyloid fibrils; twisting angle; polymorphism; membrane orientation; computational modeling

МОДЕЛЮВАННЯ ЗВ'ЯЗУВАННЯ АМІЛОЇДНИХ ФІБРИЛ З ЛІПІДНИМ БІШАРОМ**В. Трусова***Кафедра ядерної та медичної фізики, Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна**пл. Свободи 4, Харків, 61022, Україна*

За допомогою різних методів комп'ютерного моделювання було сконструйовано амілоїдні фібрили лізоциму, А β -білка та аполіпопротеїну А-І, а також було досліджено сорбцію фібрилярних агрегатів на поверхню ліпідного бішару. Структури амілоїдних фібрил, які відрізнялися за своїм кутом закручення, було згенеровано за допомогою програми CreateFibril. Стабільність отриманих агрегатів була оцінена на основі серверу AQUASOL. Енергетично оптимальна орієнтація фібрилярних агрегатів на мембрані була ідентифікована за допомогою серверу PPM. Знайдено, що зростання періодичності амілоїдів приводить до збільшення вільної енергії переносу пептидів з водної фази в ліпідну.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: амілоїдні фібрили; кут закручування; поліморфізм; орієнтація у мембрані; комп'ютерне моделювання

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ АМИЛОИДНЫХ ФИБРИЛ С ЛИПИДНЫМ БИСЛОЕМ**В. Трусова***Кафедра ядерной и медицинской физики, Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина**пл. Свободы 4, Харьков, 61022, Украина*

С помощью различных методов компьютерного моделирования были сконструированы амилоидные фибриллы лизоцима, А β -белка и аполипопротеина А-І, а также было изучена сорбция фибриллярных агрегатов на поверхность липидного бислоя. Структуры амилоидных фибрилл, которые отличались углом закручивания, были сгенерированы с помощью программы CreateFibril. Стабильность полученных агрегатов была оценена на основании сервера AQUASOL. Энергетически оптимальная ориентация фибриллярных агрегатов на мембране была идентифицирована с помощью сервера PPM. Показано, что увеличение периодичности амилоидов приводит к возрастанию свободной энергии переноса пептидов из водной в липидную фазу.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: амилоидные фибриллы; угол закручивания; полиморфизм; ориентация в мембране; компьютерное моделирование

The self-assembly of specific proteins and peptides into highly ordered supramolecular aggregates (amyloid fibrils) is currently attracting a growing interest in a variety of research areas from biomedicine to nanotechnology [1,2]. The unique physical and structural properties of amyloid fibrils make them the promising candidates for the design of novel functional materials and devices [3]. However, the main focus in amyloid research is essentially shifted towards elucidating the role of fibrillar assemblies in pathogenesis of so-called conformational diseases, such as neurological disorders (Parkinson's, Alzheimer's and Huntington's diseases), type II diabetes, systemic amyloidosis, spongiform encephalopathies, etc. [4]. The impairment of cell functions by fibrillized proteins and intermediates is causatively linked to the complex conformational behavior of these aggregates, which are distinguished by the presence of a core cross- β -sheet structure with β -strands orienting perpendicularly to the fibril long axis and β -sheets propagating in its direction [1]. Such molecular architecture is stabilized by the main-chain hydrogen bonding, ionic pairing, van der Waals, aromatic π - π interactions and hydrogen bonds between amino-acid side chains [5-7]. Another fundamental feature of fibrillar state is associated with the formation of topologically distinct structures, such as twisted ribbons, helical ribbons and nanotubes [8]. The twisting ability of amyloid is controlled by chirality [9,10], electrostatics [11,12], as well as entropic contributions arising from solvent rearrangement around side chains and backbone dynamics [11]. Importantly, the morphology of amyloid assemblies is supposed to be an essential determinant of their cytotoxicity [13].

Ample evidence suggests that toxic action of fibrillar aggregates is primarily targeted at cell membranes [14]. It was demonstrated that amyloid-induced cellular dysfunction may result from the alterations in membrane integrity and physicochemical characteristics, involving the changes in lipid bilayer permeability, lipid loss, receptor activation,

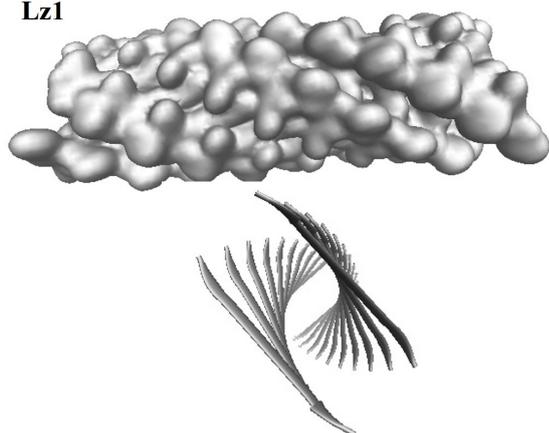
membrane fragmentation, etc. [15], with the extent of membrane perturbations being dependent on structural properties of the protein aggregates [16]. Subtle modifications in growth conditions along with different modes of intramolecular and side-chain interactions may produce a wide collection of amyloid polymorphs with distinct molecular architecture formed by the same amino acid sequence [12]. In view of this, establishing a correlation between the structural peculiarities of amyloid aggregates and their ability to interact with lipid bilayer and modify its structure seems to be of utmost importance for uncovering the molecular details of fibril cytotoxicity. Since experimental solving of this problem is still hardly feasible, increasing attention is given to computational analytical tools. The present contribution is devoted to exploring the interactions of different structural variants of amyloid fibrils with lipid membranes using the computer modeling approach. Our goal was threefold: i) using the computational framework of CreateFibril web resource to construct the polymorphic amyloid fibrils of hen egg white lysozyme, A β , and apolipoprotein A-I peptides, differing in their twisting angle; ii) to assess the stability of constructed fibrils in water with AQUASOL tool and to identify the most energetically favorable polymorphs; iii) to predict the mode of amyloid association with lipid bilayer using the PPM web server.

CONSTRUCTION AND STABILITY OF PEPTIDE AMYLOID FIBRILS

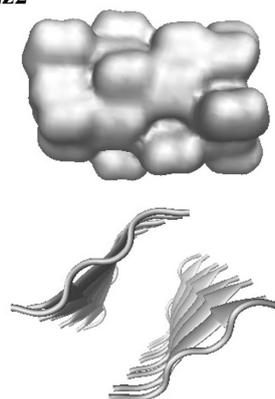
CreateFibril tool was used to construct the amyloid fibrils of the peptides from hen egg white lysozyme, A β and apolipoprotein A-I [17]. More specifically, the analyzed peptide sequences involve:

- K-peptide of lysozyme, GILQINSRW, residues 54-62 of wild-type protein, (**Lz1**),
- derivative of K-peptide, IFQINS (**Lz2**),
- peptide (residues 24-50) from G26R-mutated apolipoprotein A-I, DSRRDYVSQFEGSALGKQLNLKLLDNW (**A-I**)
- peptide from A β protein, LVFFAEDVGSNKGAIIGLMVGGVVIA, residues 17-42 of A β (**A β**).

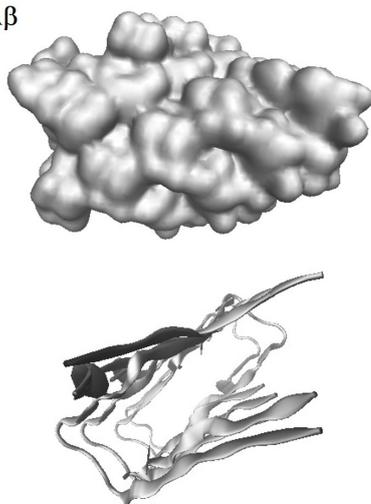
Lz1



Lz2



A β



A-I

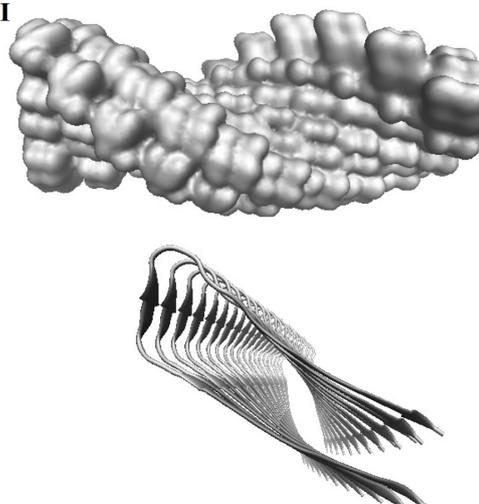


Fig. 1. Side and cross-sectional view of the fibrils constructed with the use of CreateFibril software.

The structure of **Lz1** dimer, used as input for CreateFibril, was generated from Lz1 monomer in β -strand conformation with PatchDock and FireDock tools [18,19]. **Lz2** dimer was obtained in similar way but monomeric structure was taken from Protein Data Bank (PDB code 4R0P). **A-I** dimer was created as described in [20], while **A β**

tetramer was taken from Protein Data Bank (PDB code 2BEG). The choice of the peptides **Lz1**, **A-I** and **A β** was dictated by the fact that they represent the core of the amyloid fibrils from corresponding proteins. Peptide **Lz2** was used to bring out the effect of amino acid sequence on the amyloid stability and fibril-lipid interactions.

The mathematical background of CreateFibril software involves translational and rotational affine transformations which allow creating several identical copies of the fibril fragment and stacking them side-by-side, elongating thereby the fibrillar aggregate [18]. The procedure of the fibril constructing requires the following parameters: i) the number of protofilaments and their packing distance perpendicular to fibril axis, n and R , respectively; ii) the direction of fibril axis; iii) the fibril length (the number of monomers), r ; iv) the distance between β -strands along the fibril axis, d ; v) the rotation angle of amyloid monomers along the fibril axis (twisting angle), θ . While creating the amyloid structures studied here, the parameters R and d were taken as 5 Å, n was 2, 4, 1 and 2 for **Lz1**, **Lz2**, **A β** and **A-I**, respectively. Parameter r was set as 4 for **A β** and 10 for the rest of the peptides. Rotation angle was allowed to vary from 0 to 40° degrees (with a 5° step). The differences in the input parameters are explained by the distinct structural features and amyloid-forming propensities of the examined peptides. Such kind of modeling yields nine fibrillar structures for every peptide, whose representative pictures are given in Fig. 1. As seen from this figure, the constructed fibers are characterized by repeated intertwined structure, enriched in β -sheets, which represents the hallmark of amyloid aggregates.

The next step of the study was directed towards assessing the stability of created fibrillar structures. To achieve this goal, the free energies of the fibrils were computed in water as a sum of Lennard-Jones, Coulomb and solvation energies using the AQUASOL server [21]. Specifically, this program solves the dipolar Poisson-Boltzmann-Langevin (DPBL) equation for a given system. In DPBL formalism the solvent is represented as a collection of orientable dipoles with nonuniform concentration. This results in nonlinear dependence of permittivity on the atom position and local electric field at this position. DPBL approach is supposed to be the most adequate in calculating the energetic profiles of biomolecules. The solution of DPBL equation yields the electrostatic potential at each position. The procedure of AQUASOL simulations includes, first, the hydration of amyloid fibrils and their equilibration in water followed by calculations of the free energies. The recovered dependencies of the fibril energy on its twisting angle are presented in Fig. 2. Analysis of these profiles showed that the most stable fibrillar aggregates have the twisting angles of 15, 5, 20 and 20° for **Lz1**, **Lz2**, **A β** and **A-I**, respectively.

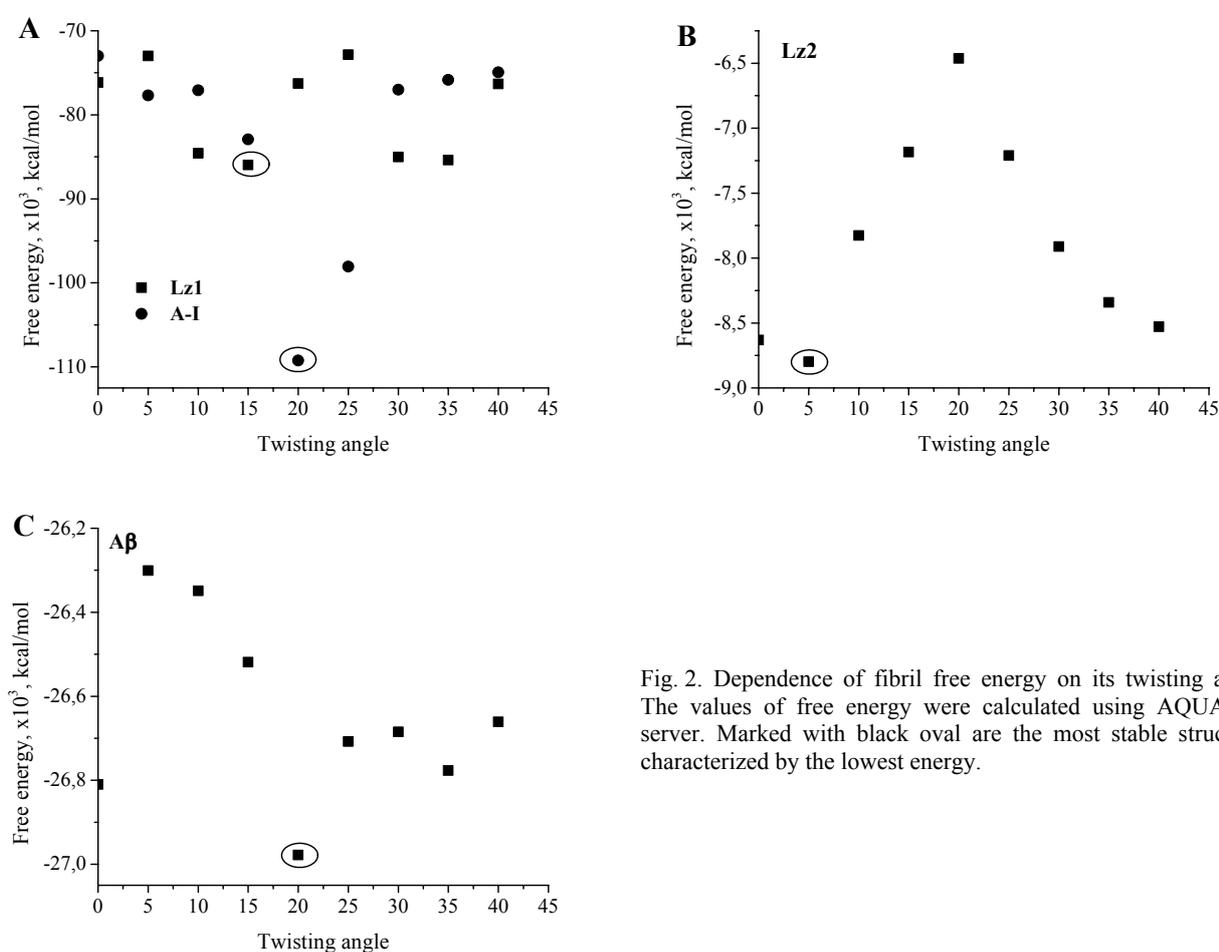


Fig. 2. Dependence of fibril free energy on its twisting angle. The values of free energy were calculated using AQUASOL server. Marked with black oval are the most stable structures characterized by the lowest energy.

In the present context it is worth of mentioning that molecular origin of the amyloid twist is still a matter of extensive debates. Originally, the main reason for the intertwining of the protofibrils is thought to be the intrinsic chirality of amino acid residues [22]. However, further progress in amyloid physics showed that twisting of fibrillar aggregates arises from the balance between fibril elasticity and electrostatic repulsion [23]:

$$U = \frac{1}{2}M\theta^2 + \frac{k_B T 2\pi\nu^2 Q e^{-\kappa D}}{\kappa \sin \theta}, \quad (1)$$

where U is the total energy of the twisting, M is the torsional modulus of the fibrils, ν , κ and Q denote the linear charge density of the fibril, the inverse Debye length and the Bjerrum length, respectively, θ is the twist angle. The first term in this equation represents the elastic torsional energy, which opposes the twist, while the second term stands for screened electrostatic potential of the twisted fibrils, which promotes the twist. In a flat configuration the distance between the charges of the same sign may not be sufficient to compensate the energetic costs connected with the electrostatic repulsion. In turn, rotation around the long axis increases the distance between the charges, minimizing thereby the electrostatic repulsion. However, increased separation between the consecutive polypeptide segments creates the penalty in elastic energy favoring the flattered configuration. The final twist of the amyloid fibril is determined by the delicate balance between the above processes.

The widely accepted model of amyloid structure assumes that the stacked pleated β -sheets are twisted in such a way that a repeating unit of 24 β -strands constitutes a full helical turn around the fibril axis [24]. Such a configuration generates the twist of 15° between the neighboring β -strands. The twisting angles 15 - 20° recovered here for the most stable configurations of **Lz1**, **A β** and **A-I** fibrils are in a good harmony with the above model. The only exception is **Lz2** fibrils, for which the most stable structure corresponds to the twisting angle 5° . This finding may be explained by the small length of the constructed fibrils which does not allow the high twist angle, since in this case the large elastic energy penalty is created. However, it is expected that propagation of the fibril would shift the twisting angle, that characterizes the most stable structure, to the higher values.

MODELING OF AMYLOID FIBRIL ASSOCIATION WITH LIPID MEMBRANES

In the following, it was of interest to simulate the adsorption of the constructed fibrillar aggregates onto the lipid bilayer. In view of the crucial role of fibril-induced membrane disruption in amyloid cytotoxicity, the analysis of protein aggregate orientation within the membrane may be of particular importance for elucidating the molecular-level details of their destructive effect. The simulations were performed on the basis of online *PPM server*, which can predict the membrane positions of both peripheral and integral proteins [25]. Specifically, spatial arrangement of proteins in membranes is determined by minimizing their transfer energies from water to lipid bilayer. Additional output parameters include the depth of peptide protrusion into the nonpolar membrane region, tilt angle (the angle between the peptide axis and the bilayer normal) and the residues embedded into membrane hydrocarbon core. The calculation is based on the universal solvation model which accounts for hydrophobic, van der Waals, H-bonding and electrostatic solute-solvent interactions [26]. In this model lipid bilayer is represented as a fluid anisotropic medium characterized by dielectric constant (ϵ), solvatochromic dipolar parameter (π^*), and H-bonding acidity and basicity parameters (α and β). The nonpolar bilayer region of is modeled as a planar slab of adjustable thickness whose interior resembles the decadiene. Interfacial polarity of the membrane is simulated based on EPR, X-ray and spin-labeling experimental measurements of water concentration in the membrane interior [25].

Within the framework of solvation model, the transfer energy of a solute molecule from aqueous phase to the arbitrary position in the membrane accounts for the dependence of the solvation parameters σ_i and η on the atom position along the bilayer normal (z_i), and is given by:

$$\Delta G^{transfer}(d, \varphi, \tau) = \sum_{i=1}^N \sigma_i^{wat \rightarrow bil}(z_i) ASA_i + \sum_{j=1}^M \eta_j^{wat \rightarrow bil}(z_j) \mu_j + \sum_{k=1}^L \min\{\Delta E_k^{ion}, \Delta E_k^{neutr}\}, \quad (2)$$

where $\sigma_i(z_i)$ stands for the solvation parameter, depending on the atom type and describing the surface energy transfer per \AA^2 of i -th atom from water to the point z_i on the membrane, ASA_i is a solvent-accessible surface area of i -th atom, $\eta(z_j)$ defines the energy cost of the transferring the dipole moment of 1D from water to point z_j , μ_j – the dipole moment of group j , E_k^{ion} and E_k^{neutr} represent the energies of ionized group k in ionized and neutral states, respectively, N is the number of atoms in the molecule, M is the number of group dipoles, L is the number of ionizable groups, d , φ and τ define the sift along the bilayer normal, rotational and tilt angle, respectively.

The individual dipolar contributions were assumed to linearly decrease to zero when ASA of the atom associated with the dipole moment becomes smaller than the hydration area occupied by a single molecule of water ($ASA_{water} \approx 14 \text{ \AA}^2$):

$$\Delta G_{dip,j} = \eta_j^{wat \rightarrow bil}(z_j) \mu_j, \quad \text{if } ASA_j > ASA_{water} \quad (3)$$

$$\Delta G_{dip,j} = \eta_j^{wat \rightarrow bil}(z_j) \mu_j (ASA_j / ASA_{water}), \quad \text{if } ASA_j \leq ASA_{water} \quad (4)$$

Analogous approximation of Born energy for ionized groups yields:

$$\Delta E_k^{ion} = \frac{166e_{Born}}{r_k} [F_{Abe}^{wat} - F_{Abe}(z_k)] f_k + \sum_{i=1}^{L_k} \sigma_{l,ion}^{wat \rightarrow bil}(z_l) ASA_l, \quad \text{if } ASA_k > ASA_{water} \quad (5)$$

$$\Delta E_k^{ion} = \frac{166e_{Born}}{r_k} [F_{Abe}^{wat} - F_{Abe}(z_k)] (ASA_k / ASA_{water}) f_k + \sum_{i=1}^{L_k} \sigma_{l,ion}^{wat \rightarrow bil}(z_l) ASA_l, \quad \text{if } ASA_k \leq ASA_{water} \quad (6)$$

where coefficient $f_k = 0.5$ if the group is involved in ion pairing, and $f_k = 1$ for the rest of cases.

Analysis of the binding of constructed amyloid fibrils to the lipid membranes allowed us to determine the energetically preferable orientation of the aggregates relative to lipid-water interface, as well as the energetics of protein-lipid binding. Notably, we found it reasonable to analyze not only the most stable structures, but also those covering the entire range of the examined twisting angles.

Table 1

Structural and thermodynamic parameters characterizing membrane location and orientation of Lz1 and Lz2 fibrils

Twist angle	ΔG , kcal/mol		Depth*, Å		Tilt angle		Embedded residues	
	Lz1	Lz2	Lz1	Lz2	Lz1	Lz2	Lz1	Lz2
0	-34	-18.8	7	3.9	89	90	I2, L3, W9, I10**	F2, I4, S6
5	-32	-18.4	5.1	4.4	90	87	I2, L3, W9, I10	F2, I4, S6
10	-24	-16.7	4.4	4.7	989	86	I2, L3, W9, I10	F2, I4, S6
15	-16	-16.1	4.2	7.9	87	80	I2, L3, W9, I10	I1 – I4
20	-12.5	-12.4	2.5	5.8	89	82	I2, I10	I1 – I4
25	-12.3	-11.5	2.1	5.2	90	88	I10	I1, F2, S4
30	-11	ND	1.7	ND	90	ND	I10	ND
35	-9.5	-9.8	1.5	5.2	89	87	I10	I1, F2, S4
40	-10.3	-8.2	1.7	5.3	90	90	I10	I1, F2, S4

*depth of penetration into the hydrocarbon core of lipid bilayer

**I10 means the first residue of the second monomer

Table 2

Structural and thermodynamic parameters characterizing membrane location and orientation of A β and A-I fibrils

Twist angle	ΔG , kcal/mol		Depth, Å		Tilt angle		Embedded residues	
	A β	A-I	A β	A-I	A β	A-I	A β	A-I
0	-36.6	-26.8	18.4	2	90	88	G17-V23, F28* - I40, G42	L38
5	-34	-23.4	19	2.1	85	88	G17-I24, F28-I41	L38
10	-36.4	-18.8	17.8	3.6	85	87	G17-I24, F28-I40	L38
15	-33.5	-14.9	16.4	4.3	84	83	G17-I24, A30-I41	L38
20	-28.9	-11.9	16.8	4.1	89	79	G17-V22, F29-I40	L38
25	-22.4	-9.9	17.4	4.4	59	81	G17-G21, V33-I40	L38
30	-20	-8.5	19.2	5.3	47	74	G17-V22, V33-I40	L38
35	-23.2	-8.3	23.2	2	14	87	G17-V22, A30-G38	D24, L38
40	-26.2	-8.9	23.8	1.4	7	85	G17-V22, E31-G38	S36, L38

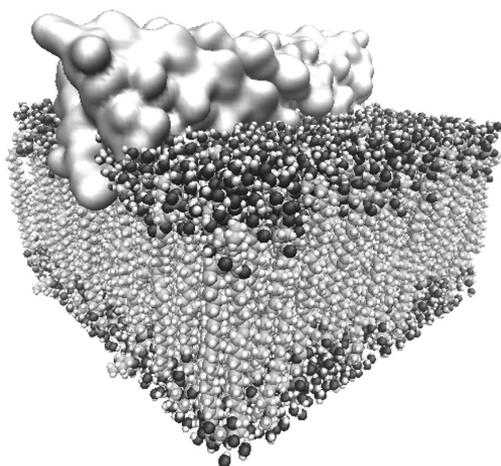
*the residues after 26th belong to the next monomer

Recent experimental data from single molecule atomic force microscopy showed that amyloid periodicity is a tunable parameter whose initial value is sensitive to the changes of experimental variables [23]. In particular, increasing salt concentration was reported to bring about continuous decrease in amyloid pitch, and corresponding twisting angle, according to the dependence:

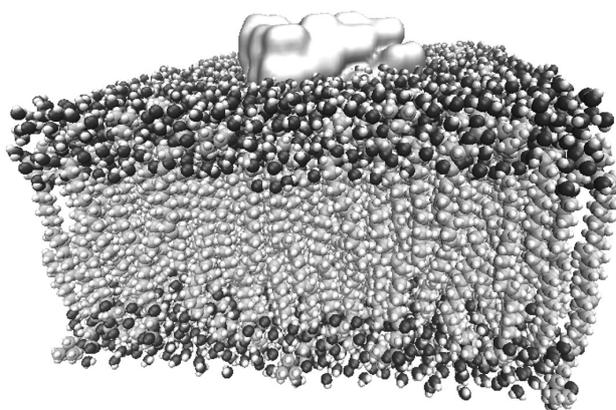
$$L_2 = L_1 \left[\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right)^{1/2} + \frac{\alpha_2}{4\pi} (\kappa_1 - \kappa_2) L_1^{3/2} \right]^{-2/3}, \quad (7)$$

where L , κ are the fibril pitch of the fibril and inverse Debye length, the subscript denotes salinity regime – 1 or 2 (i.e. ionic strength I_1 or I_2), α_2 is the parameter at ionic strength 2, depending on the intrinsic characteristics of the fibrils (charge density, geometry, elastic rigidity). Elevation of the ionic strength screens the electrostatic interactions within the fibrils and decreases the contribution of the second term in Eq. (1), causing the relaxation of fibril tilt and its untwisting. The weakened electrostatic interactions may alter the H-bonding distribution along the fibrillar aggregates and their mechanical stability, the parameters that also underlie the structural configuration of the amyloid.

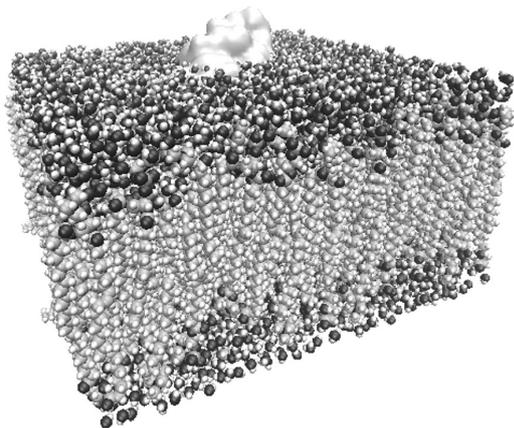
Lz1



Lz2



Aβ



A-I

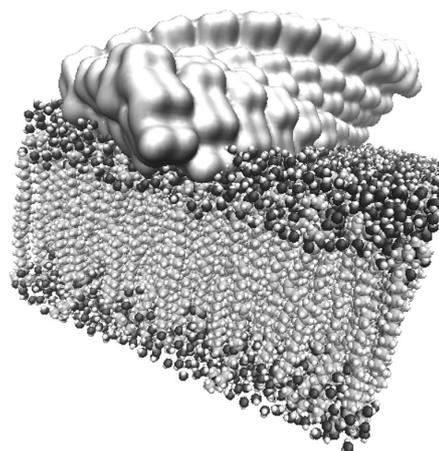


Fig. 3. Representative snapshots of amyloid fibril binding to the lipid bilayers simulated with *PPM* server.

The results of calculations performed with *PPM* are shown in Tables 1, 2, and the representative snapshots are given in Fig. 3. As judged from the tables, the position of amyloid fibrils in the membrane and energetics of peptide-lipid binding is strongly determined by amino acid sequence and the twist of the polypeptide chain. The recovered values of the tilt angle indicate that preferable orientation of amyloid fibrils from **Lz1**, **Lz2** and **A-I** peptides is parallel or slightly tilted with respect to the bilayer surface. In contrast, **Aβ** fibrils were found to reside parallel to membrane surface only up to twisting angle of *ca.* 20°, while further increase in θ was followed by the rise in tilt angle up to 7° (Table 2), the value corresponding to almost perpendicular orientation to the bilayer surface.

Furthermore, the general tendency observed for all peptides is the decrease in transfer energy upon increasing twisting angle of the fibrils. This means that it is becoming energetically unfavorable for the peptide to insert into the lipid bilayer with increasing its periodicity and amyloid fibrils tend to locate at lipid/water interface or in the membrane polar region. This effect can be explained by at least two factors. The first one is that different amino acid residues participate in peptide-lipid binding depending on the fibril twist. According to White-Wimley hydrophobicity scale, the free energy of transfer of individual amino acid residues from water to the lipid phase varies substantially from residue to residue and is controlled by residue charge, chemical structure and its polarity [27]. If one take, for the sake of illustration, the peptide **Lz1** and calculate roughly the sum of transfer energy contributions from each residue (see Fig. 8C in [27] for the values of transfer energies for each amino acid) taking part in membrane penetration (ΔG^{sum}), it appears that at $\theta = 5^\circ$, $\Delta G^{sum} = \Delta G^{I2} + \Delta G^{L3} + \Delta G^{W9} + \Delta G^{I10} = -0.31 - 0.56 - 1.85 - 0.31 = -3.03$ kcal/mol, while at $\theta = 40^\circ$ $\Delta G^{sum} = \Delta G^{I10} = -0.31$ kcal/mol. Analogously, for **A-I** fibrils at $\theta = 5^\circ$ $\Delta G^{sum} = \Delta G^{L38} = -0.56$ kcal/mol, while at $\theta = 40^\circ$ $\Delta G^{sum} = \Delta G^{L38} + \Delta G^{D24} = -0.56 + 1.23 = 1.59$ kcal/mol. These calculations show that variation even in one amino acid residue, being in contact with nonpolar bilayer region may significantly change the free energy of transfer. Furthermore, one should bear in mind that the difference in ΔG^{sum} (and, as a consequence, the overall $\Delta G^{transfer}$) in our systems may be further increased if one takes into account the inter-residue interactions within the fibrils, their structural peculiarities, as well as the other constituents of total transfer energy, the factors that were neglected upon these rough calculations and that may substantially change the transfer energy of individual residues. However, evidently, the difference in the nature of amino acid residues, protruding the membrane hydrophobic region, is not the only reason for the observed increase in absolute values of $\Delta G^{transfer}$. Specifically, for all peptides we observed the rise in free energy at increasing twisting angle that was not accompanied by the change in amino acid residues embedded into nonpolar core of lipid bilayer. For example, in the case of **Lz1** elevation of the twisting angle from 5 to 15 degrees resulted in two-fold increase in $\Delta G^{transfer}$ despite the observation, that amino acid residues penetrating the acyl chain region were the same in both cases (Table 1). This finding can be rationalized in terms of the alterations in physicochemical and structural properties of the amino acid residues (such as *ASA*, the ability to form H-bonds, polarity characteristics, arrangement in β -stacks, etc.) upon increasing the twisting angle.

Notably, modeling of increasing twist of peptide aggregates may resemble the maturation of amyloid from oligomeric nucleus. At the beginning of fibril growth phase, the protofilaments have a flat structure, and their intertwining is rare and random across the contour length. However, the magnitude of twisting angle and the number of twisting points increases with incubation time [12]. Furthermore, according to the prevailing concepts, amyloid intermediates (oligomeric aggregates with small twist) are thought to have much more pronounced impact on membrane structure compared to mature fibers with high twist. In view of this, the findings outlined here, may provide the possible explanation for this phenomenon, i.e. it is thermodynamically unfavorable for grown fiber to penetrate the membrane, since its twisted structure would require much more energy for membrane to adjust its contact region to the intertwined structure of the fibrils.

CONCLUSIONS

- 1) Based on the different computational approaches, in the present work we constructed the core region of amyloid fibrils from hen egg white lysozyme, A β -peptide and apolipoprotein A-I, and analyzed their association with lipid membranes.
- 2) Simulation of the amyloids using the *CreateFibril* software showed that all fibrillar aggregates are characterized by the repeated twisted β -stacked structure, a characteristic signature of amyloid assembly. Subsequent evaluation of fibril free energy on the basis of *AQUASOL* server allowed identifying the twisting angle ensuring the most stable structure for every of the examined peptides.
- 3) Modeling fibril-lipid interactions with *PPM* tool showed that elevating amyloid twist results in increasing transfer energy of the peptide from water to lipid environment. The molecular determinants of this observation were supposed to involve chemical structure, *ASA* and the number of amino acid residues penetrating the membrane hydrocarbon core.

The obtained results may prove to be useful in elucidation the molecular-level details of amyloid cytotoxicity mechanisms.

REFERENCES

1. Harrison R.S., Sharpe P.C., Singh Y., Fairlie D.P. Amyloid peptides and proteins in review // *Rev. Physiol. Biochem. Pharmacol.* – 2007. – Vol. 159. – P. 1-77.
2. Chiti F. Dobson C. Protein misfolding, functional amyloid, and human disease // *Ann. Rev. Biochem.* – 2006. – Vol. 75. – P. 333-366.
3. Pham C.L.L., Kwan A.H., Sunde M. Functional amyloid: widespread in nature, diverse in purpose // *Essays Biochem.* – 2014. – Vol. 56. – P. 207-219.

4. Wei W., Wang X., Kusiak J.W. Signaling events in amyloid β -peptide-induced neuronal death and insulin-like growth factor I protection // *J. Biol. Chem.* – 2002. – Vol. 277. – P. 17649-17656.
5. Nelson R., Sawaya M., Balbirnie M., Madsen A., Riekel C., Grothe R., Eisenberg D. Structure of the cross-beta spine of amyloid-like fibrils // *Nature.* – 2005. – Vol. 435. – P. 773-778.
6. Makin O., Atkins E., Sikorski P., Johansson J., Serpell L. Molecular basis for amyloid fibril formation and stability // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 2005. – Vol. 105. – P. 315-320.
7. Lara C., Adamcik J., Jordens S., Mezzenga R. General self-assembly mechanism converting hydrolyzed globular proteins into giant multistranded amyloid ribbons // *Biomacromolecules.* – 2011. – Vol. 12. – P. 1868-1875.
8. Usov I., Adamcik J., Mezzenga R. Polymorphism in bovine serum albumin fibrils: morphology and statistical analysis // *Faraday Discuss.* – 2013. – Vol. 166. – P. 151-162.
9. Aggeli A. Hierarchical self-assembly of chiral rod-like molecules as a model for peptide β -sheet tapes, ribbons, fibrils, and fibers // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 2001. – Vol. 98. – P. 11857-11862.
10. Nyrkova I. Self-assembly and structure transformations in living polymers forming fibrils // *Eur. Phys. J. B.* – 2000. – Vol. 17. – P. 499-513.
11. Periolo X., Rampioni A., Vendruscolo M., Mark A. Factors that affect the degree of twist in β -sheet structures: a molecular dynamics simulation study of cross- β filament of the GNNQQNY peptide // *J. Phys. Chem. B.* – 2009. – Vol. 113. – P. 1728-1737.
12. Adamcik J., Mezzenga R. Protein fibrils from a polymer physics perspective // *Macromolecules.* – 2012. – Vol. 45. – P. 1137-1150.
13. Petkova A. Self-propagating, molecular-level polymorphism in Alzheimer's beta-amyloid fibrils // *Science.* – 2005. – Vol. 307. – P. 262-265.
14. Zerovnik E. Amyloid-fibril formation. Proposed mechanisms and relevance to conformational disease // *Eur. J. Biochem.* – 2002. – Vol. 269. – P. 3362-3371.
15. Trusova V., Gorbenko G., Girysh M., Adachi E., Mizuguchi C., Sood R., Kinnunen P., Saito H. Membrane effects of N-terminal fragment of apolipoprotein A-I: a fluorescent probe study // *J. Fluoresc.* – 2015. – Vol. 25. – P. 253-261.
16. Kastorna A., Trusova V., Gorbenko G., Kinnunen P. Membrane effects of lysozyme amyloid fibrils // *Chem. Phys. Lipids.* – 2012. – Vol. 165. – P. 331-337.
17. Smaoui M. Computational assembly of polymorphic amyloid fibrils reveals stable aggregates // *Biophys. J.* – 2013. – Vol. 104. – P. 683-693.
18. Schneidman-Duhovny D., Inbar Y., Nussimov R., Wolfson H. PatchDock and SymmDock: servers for rigid and symmetric docking // *Nucl. Acids Res.* – 2005. – Vol. 33. – P. W363-W367.
19. Andrusier N., Nussimov R., Wolfson H. FireDock: fast interaction refinement in molecular docking // *Proteins.* – 2007. – Vol. 69. – P. 139-159.
20. Girysh M., Gorbenko G., Trusova V., Adachi E., Mizuguchi C., Nagao K., Kawashima H., Akaji K., Lund-Katz S., Phillips M., Saito H. Interaction of Thioflavin T with amyloid fibrils of apolipoprotein A-I N-terminal fragment: resonance energy transfer study // *J. Struct. Biol.* – 2014. – Vol. 185. – P. 116-124.
21. Koehl P., Delarue M. AQUASOL: an efficient solver for the dipolar Poisson-Boltzmann-Langevin equation // *J. Chem. Phys.* – 2010. – Vol. 132. – P. 064101-064117.
22. Dzwolak W., Pecul M. Chiral bias of amyloid fibrils revealed by the twisted conformation of Thioflavin T: an induced circular dichroism/DFT study // *FEBS Lett.* – 2005. – Vol. 579. – P. 6601-6603.
23. Adamcik J., Mezzenga R. Adjustable twisting periodic pitch of amyloid fibrils // *Soft Matter.* – 2011. – Vol. 7. – P. 5437-5443.
24. Sunde M. Common core structure of amyloid fibrils by synchrotron X-ray diffraction // *J. Mol. Biol.* – 1997. – Vol. 273. – P. 729-739.
25. Lomize M., Pogozheva I., Joo H., Mosberg H., Lomize A. OPM database and PPM web server: resources for positioning of proteins in membranes // *Nucl. Acids Res.* – 2012. – Vol. 40. – P. D370-D376.
26. Lomize A., Pogozheva I., Mosberg H. Anisotropic solvent model of the lipid bilayer. 2. Energetics of insertion of small molecules, peptides, and proteins in membranes // *J. Chem. Inf. Model.* – 2011. – Vol. 51. – P. 930-946.
27. White S., Whimley W. Membrane protein folding and stability: physical principles // *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* – 1999. – Vol. 28. – P. 319-365.

PACS: 66.70.-f; 63.20.kg; 61.72.S-

ABOUT CONDITIONS OF EXISTENCE OF SECOND SOUND WAVES IN ISOTOPICALLY ENRICHED CRYSTALS ${}^7\text{LiF}$

V.D. Khodusov, A.S. Naumovets

Kharkiv National Karazin University
4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine
E-mail: ykhodusov@ukr.net

Received June 5, 2015

Concerted parameters of the single crystal LiF (temperature, concentration of isotopes and sample sizes) were found in a reduced isotropic crystal model and in the Callaway model of thermal conductivity. They define the region of existence of second sound waves. These areas do not significantly differ from each other, which ensures the accuracy of the results. It was found, that the concentration of the isotope ${}^6\text{Li}$ less than $3 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-3}$ and the sample sizes greater than 0,8 cm, offers the possibility of the second sound waves propagation in lithium fluoride in the temperature range of thermal conductivity maximum. The other concerted parameters, that define the "window" of existence of second sound waves, for lower concentrations of isotopes can be determined from three-dimensional graphs.

KEY WORDS: second sound waves, normal and resistive processes, phonons, isotopes

ПРО УМОВИ ІСНУВАННЯ ХВИЛЬ ДРУГОГО ЗВУКА У ІЗОТОПІЧНО ЗБАГАЧЕНИХ КРИСТАЛАХ ${}^7\text{LiF}$

В.Д. Ходусов, А.С. Наумовець

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61022, Харків, м. Свободи, 4

Знайдено узгоджені значення параметрів монокристалу LiF (температури, концентрації ізоотопів і розмірів зразка) в моделі зведеного ізотропного кристала і моделі Каллавея в теплопровідності, які визначають область існування хвиль другого звуку. Ці області несуттєво відрізняються один від одного, що забезпечує достовірність отриманих результатів. Встановлено, що при концентрації ізоотопу ${}^6\text{Li}$ нижче $3 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ і розмірах зразка більших ніж 0,8 см, можливе розповсюдження хвиль другого звуку у фториді літію в області температур в окілі максимуму коефіцієнта теплопровідності. Для менших концентрацій ізоотопів інші узгоджені параметри, що визначають «вікно» існування хвиль другого звуку, можна визначити з наведених тривимірних графіків.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: хвилі другого звуку, нормальні та резистивні процеси, фонони, ізоотопи

ОБ УСЛОВИЯХ СУЩЕСТВОВАНИЯ ВОЛН ВТОРОГО ЗВУКА В ИЗОТОПИЧЕСКИ ОБОГАЩЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ ${}^7\text{LiF}$

В.Д. Ходусов, А.С. Наумовец

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61022, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Найдены согласованные значения параметров монокристалла LiF (температуры, концентрации изотопов и размеров образца) в модели приведенного изотропного кристалла и модели Каллавея теплопроводности, которые определяют область существования волн второго звука. Эти области несущественно отличаются друг от друга, что обеспечивает достоверность полученных результатов. Установлено, что при концентрации изотопа ${}^6\text{Li}$ ниже $3 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ и размерах образца больших чем 0,8 см, возможно распространение волн второго звука во фториде лития в области температур в окрестности максимума коэффициента теплопроводности. Для меньших концентраций изотопов остальные согласованные параметры, определяющие «окно» существования волн второго звука, можно определить из приведенных трехмерных графиков.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: волны второго звука, нормальные и резистивные процессы, фононы, изотопы

Впервые предположение о существовании волн второго звука (ВВЗ) в твердых телах, подобным волнам второго звука в сверхтекучем гелии, было высказано Пешковым В.В. [1]. Теоретически ВВЗ в твердых телах изучались в работах [2-5]. Было установлено, что их распространение в твердых телах возможно, когда реализуется газодинамический режим в описании фононов, при котором нормальные процессы взаимодействия фононов с сохранением квазиимпульса происходят значительно быстрее, чем резистивные процессы взаимодействия фононов без сохранения квазиимпульса (процессы переброса, рассеяние на примесях, изотопах, границах и т.д.). В работе [4] впервые была найдена температурная область существования ВВЗ, так называемое, «окно». Она лежит в окрестности максимума коэффициента теплопроводности кристаллов при низких температурах, который также обусловлен учетом особой роли нормальных процессов [6,7]. Величина максимума теплопроводности сильно зависит от совершенства кристаллической решетки, наличия примесей и изотопического состава [6,8]. Экспериментально ВВЗ наблюдались только в некоторых кристаллах: в твердом гелии [9], NaF [10], висмуте [11] и сапфире [12].

Невозможность наблюдения ВВЗ в других кристаллах связана с сильным затуханием этих волн на примесях и изотопах. Таким образом, в чистых совершенных монокристаллах основной вклад в затухание волн

второго звука будет давать изотопическое рассеяние фононов. В 70-е годы были предприняты неудачные попытки экспериментального обнаружения ВВЗ во фториде лития, которые были обусловлены достаточно высокой концентрацией ${}^6\text{Li}$. Современные технологии дают возможность получать изотопически чистые идеальные монокристаллы. Возникает задача нахождения таких концентраций изотопов, при которых они не оказывают влияния на распространение ВВЗ. Эту задачу можно решить, используя модель приведенного изотропного кристалла относительно модулей упругости для описания термодинамических и кинетических свойств газа фононов [13], либо используя значения частот столкновений фононов в модели Каллауэя при описании экспериментальных данных по теплопроводности [6,8]. При этом необходимо учитывать, что при описании распространения ВВЗ фононы, прежде чем рассеяться на границе испытывают множество столкновений между собой, на что впервые обратил внимание Гуржи [14], что существенно влияет на окно существования ВВЗ. В работе [15] теоретически исследовалась возможность наблюдения ВВЗ в изотопически обогащенных кристаллах алмаза.

Чистые монокристаллы LiF являются наиболее предпочтительными для экспериментального обнаружения в них ВВЗ. Это обусловлено наличием достаточно острого максимума коэффициента теплопроводности в области низких температур, величина которого существенно зависит от изотопического состава [6,8]. Кроме того, как было показано в работе [16], максимальное значение резонансной (на ВВЗ) спектральной плотности флуктуации энергии фононов, рассчитанное в модели приведенного изотропного кристалла, имеют кристаллы LiF.

Целью данной работы является нахождение согласованных значений параметров монокристалла LiF (температуры, концентрации изотопов и размеров образца), которые определяют область существования ВВЗ в модели приведенного изотропного кристалла и модели Каллауэя. Несущественные отличия полученных параметров в двух моделях, не связанных между собой, будет обеспечивать достоверность полученных результатов.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ВОЛН ВТОРОГО ЗВУКА В МОДЕЛИ ПРИВЕДЕННОГО ИЗОТРОПНОГО КРИСТАЛЛА

Распространение вторичных волн в газе бозе-квазичастиц в твердых телах изучалось в работе [13] на основе газодинамических уравнений квазичастиц, в частности, волн второго звука (ВВЗ) в газе фононов в диэлектрических кристаллах. При этом частота второго звука определяется выражением $\Omega_{II} = W_{II} \tilde{k}$, фазовая скорость W_{II} и коэффициент затухания Γ_{II} волн второго звука в изотропном газе квазичастиц имеют следующий вид:

$$W_{II} = (TS^2/C\tilde{\rho})^{1/2}; \quad \Gamma_{II} = \frac{r}{2\tilde{\rho}} + \left[\frac{1}{2\tilde{\rho}} \left(\frac{4}{3} \tilde{\eta} + \tilde{\zeta} \right) + \frac{1}{2C} \tilde{\varkappa} \right] \tilde{k}^2.$$

Здесь C , S , $\tilde{\rho}$ – плотности фононной теплоемкости, энтропии и числа фононов, r – коэффициент внешнего трения, обусловленный взаимодействием фононов с не сохранением квазиимпульса (процессы переброса, рассеяние на примесях, изотопах и на границах образца), $\tilde{\eta}$, $\tilde{\zeta}$ – коэффициенты первой и второй вязкости, $\tilde{\varkappa}$ – коэффициент теплопроводности, \tilde{k} – волновой вектор ВВЗ.

Если ввести диффузионные времена следующими соотношениями:

$$\tau_{\tilde{\eta}} = \frac{\tilde{\eta}}{\tilde{\rho}W_{II}^2}; \quad \tau_{\tilde{\zeta}} = \frac{\tilde{\zeta}}{\tilde{\rho}W_{II}^2}; \quad \tau_{\tilde{\varkappa}} = \frac{\tilde{\varkappa}}{CW_{II}^2}; \quad \tau_R = \frac{\tilde{\rho}}{r}, \quad (1)$$

то величина Γ_{II} может быть записана в виде:

$$\Gamma_{II} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\tau_R} + \left(\frac{4}{3} \tau_{\tilde{\eta}} + \tau_{\tilde{\zeta}} \right) \Omega^2 + \tau_{\tilde{\varkappa}} \Omega^2 \right]. \quad (2)$$

В модели приведенного изотропного кристалла значения для коэффициентов r , $\tilde{\varkappa}$, $\tilde{\eta}$, $\tilde{\zeta}$ были рассчитаны в работе [13].

Условие существования слабо затухающих ВВЗ ($\Gamma_{II} \ll \Omega$) приводит к следующему условию, накладываемому на частоту Ω , известному как "окно" существования ВВЗ [4,13]:

$$\min \{ \nu_{\tilde{\eta}}, \nu_{\tilde{\zeta}}, \nu_{\tilde{\varkappa}} \} \gg \Omega \gg \nu_R, \quad (3)$$

где частоты столкновений ν_i связаны с диффузионными временами τ_i соотношением $\nu_i = 1/\tau_i$, ν_R – частота столкновений за счет резистивных процессов (процессы переброса, рассеяния на примесях и изотопах, рассеяния на границах и др.)

Расчеты кинетических коэффициентов фононной газодинамики в модели приведенного изотропного кристалла относительно модулей упругости, проведенные в работе [13], показывают, что основную роль играет фононная вязкость. Число, подобное числу Прандтля в теории газов $\text{Pr} = C\tilde{\eta}/\tilde{\rho}\tilde{\varkappa}$, в газе фононов для

большинства кристаллов равно 10^2 с достаточно большой точностью. Величина затухания Γ_{II} может быть записана в виде:

$$\Gamma_{II} = \frac{1}{2} \left\{ \nu_R + \frac{\Omega^2}{\nu_N} \right\}, \quad \nu_N = \frac{3}{4} \nu_{\bar{\eta}} \quad (4)$$

Далее приведем формулы для частот столкновений в модели приведенного изотропного кристалла [13], учитывая, что законами сохранения энергии и квазиимпульса разрешены следующие процессы переброса между продольными (l) и поперечными (t) акустическими фононам $t + t \leftrightarrow l + b_g$ и $l + t \leftrightarrow l + b_g$.

$$\nu_{\bar{\eta}} = \frac{2\pi^2}{45} (2 + \beta^3) \frac{k_B^5}{\hbar^4} \frac{T^5}{\alpha_{\bar{\eta}} \rho V_l^2 V_t^3}, \quad (5)$$

$$\nu_U = A_1 T^{-3} e^{-\frac{\Theta_1}{T}} + A_2 T^{-1} e^{-\frac{\Theta_2}{T}},$$

$$\nu_{iso} = C_{iso} \frac{k_B^4 a^3}{4\pi \hbar^4 V_S^3} T^4 \left(\frac{\Delta M}{M} \right)^2 \frac{8! \zeta(8)}{4! \zeta(4)}, \quad (6)$$

где $A_1 = \frac{3\pi^3 \beta^2 (15 - 10\beta^2 + 3\beta^4)}{4(1 + \beta)^6 (2 + \beta^5)} (1 + \bar{b} + \bar{c})^2 \frac{\hbar^4 V_l^3}{k_B^3 \rho a^8}$; $\Theta_1 = \frac{2\pi \beta V_l \hbar}{k_B (1 + \beta) a}$,

$$A_2 = \frac{45\pi(1 - \beta)(7 - 5\beta)}{64(1 + \beta)(2 + \beta^5)\beta^2} (1 + \beta^2 + 2\bar{b} + 4\bar{c})^2 \frac{\hbar^2 V_l}{k_B \rho a^6}$$
; $\Theta_2 = \frac{\pi(1 + \beta)V_l \hbar}{2k_B a}$,

$\zeta(n)$ – дзета-функция Римана, $C_{iso} = N_i/N$ – концентрация изотопов, ΔM – разность между атомными массами изотопов и основного вещества, M – масса основных атомов, D – размеры образца, k_B – постоянная Больцмана, $\alpha_{\bar{\eta}}$, \bar{b} , \bar{c} – численные константы, значения которых для разных кристаллов приведены в таблице в работе [13].

Учет рассеяния фононов на границах осуществляется используя отношение между длиной свободного пробега за счет нормальных процессов $l_N = \tau_N V_S$ и размером образца D . Если выполняется отношение $l_N \gg D$, то эффективная длина свободного пробега фононов совпадает с размерами образца, и частота рассеяния на границе определяется как: $\nu_B = V_S/D$. ВВЗ существуют в диэлектриках при газодинамическом режиме описания фононов, который реализуется если выполняется неравенство $l_N \ll D$. Фонон в объеме образца испытывает множество нормальных столкновений до достижения границы. В результате путь, который проходит фонон до столкновения с границей, существенно возрастает. Используя хорошо известные формулы броуновского движения легко видеть, что траектории между двумя столкновениями с границей будет порядка D^2/l_N [14]. Это означает, что эффективная частота столкновения фононов с границей будет:

$$\nu_{B_{eff}} = \frac{V_S^2}{D^2 \nu_N} = \frac{\nu_B^2}{\nu_N}. \quad (7)$$

Для дальнейших расчетов будем считать, что условие существования ВВЗ выполняются, если частота второго звука удовлетворяет неравенству:

$$\Omega_{II} \geq 10\Gamma_{II}. \quad (8)$$

Из этого соотношения можно получить нижнюю и верхнюю границы частоты ВВЗ:

$$0, 1\nu_N - \sqrt{10^{-2}\nu_N^2 - \nu_N \nu_R} \leq \Omega_{II} \leq 0, 1\nu_N + \sqrt{10^{-2}\nu_N^2 - \nu_N \nu_R}. \quad (9)$$

ВВЗ являются собственными модами, поэтому если кристалл имеет характерный размер D , то значение волнового вектора ВВЗ определяется соотношением

$$\tilde{k} = \frac{2\pi}{D}. \quad (10)$$

Используя это соотношение и $\Omega_{II} = W_{II} \tilde{k}$, можно разрешить неравенство (9) и получить следующее условие:

$$C_{iso} \leq \left[0, 4 \frac{\pi W_{II}}{D} - \nu_U - \frac{V_S^2 + 4\pi^2 W_{II}^2}{D^2 \nu_N} \right] \frac{4! \zeta(4)}{8! \zeta(8)} \frac{4\pi \hbar^4 V_S^3}{k_B^4 a^3 T^4} \left(\frac{M}{\Delta M} \right)^2. \quad (11)$$

Оно позволяет построить график зависимости концентрации C_{iso} от размеров и температуры, используя который можно определить окно существования ВВЗ.

Для проведения численных оценок и вычисления условия существования слабозатухающих ВВЗ во фториде лития использованы следующие данные, рассчитанные в модели приведенного изотропного кристалла. Для модулей упругости второго порядка: $\lambda_1 = 3,4 \cdot 10^{10} \text{ H/m}^2$, $\lambda_2 = 5,15 \cdot 10^{10} \text{ H/m}^2$, $\beta = 0,613$. Зная эти выражения, плотность и постоянную решетки фторида лития, которые равны соответственно $\rho = 2,64 \text{ г/см}^3$, $a = 4,02 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, были получены следующие значения скорости продольных (l) и поперечных (t) акустических фононов, средняя скорость звука:

$$V_l = 7203 \cdot 10^2 \text{ см/с}, V_t = 4416 \cdot 10^2 \text{ см/с}, V_s = 4773 \cdot 10^2 \text{ см/с}.$$

Скорость второго звука имеет вид:

$$W_{II} = \sqrt{\frac{V_t^2}{3} \left(\frac{2 + \beta^3}{2 + \beta^5} \right)} = 2636 \cdot 10^2 \text{ см/с}$$

Приведем значения остальных необходимых численных коэффициентов для LiF:

$$\alpha_{\bar{\eta}} = 4,13 \cdot 10^{-2}, \Theta_1 = 326 \text{ K}, \Theta_2 = 346 \text{ K},$$

$$A_1 = 1,7 \cdot 10^{16} \text{ K}^3/\text{с}, A_2 = 6,9 \cdot 10^{12} \text{ K/с}.$$

Выражения для частот столкновений в модели приведенного изотропного кристалла имеют вид для LiF:

$$\begin{aligned} \nu_N &= 6,6 \cdot T^5 \text{ с}^{-1} \\ \nu_U &= 1,7 \cdot 10^{16} \cdot T^{-3} \exp\left(-\frac{326}{T}\right) + 6,9 \cdot 10^{12} \cdot T^{-1} \exp\left(-\frac{346}{T}\right) \\ \nu_{iso} &= 3,27 \cdot 10^4 \cdot T^4 C_{iso} \text{ с}^{-1} \\ \nu_{Beff} &= 3,45 \cdot 10^{10} \cdot D^{-2} \cdot T^{-5} \text{ с}^{-1}. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя эти выражения в (11), получим:

$$C_d \leq 10 \cdot T^{-4} D^{-1} - 1,38 \cdot 10^7 D^{-2} T^{-9} - 5,2 \cdot 10^{11} e^{-326/T} T^{-7} - 2,1 \cdot 10^8 e^{-346/T} T^{-5} \quad (13)$$

Область существования ВВЗ в модели приведенного изотропного кристалла ограничена поверхностью, определяемой соотношением (13), и изображена на рис. 1.

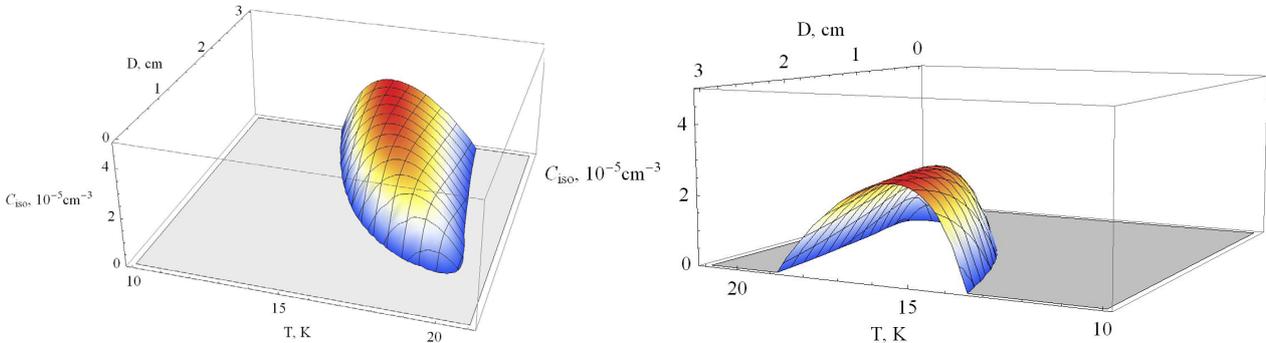


Рис. 1. Область существования ВВЗ в модели приведенного изотропного кристалла находится внутри объема ограниченного поверхностью.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ВОЛН ВТОРОГО ЗВУКА В МОДЕЛИ КАЛЛАВЭЯ

Поскольку ВВЗ существуют вблизи максимума теплопроводности, то для определения области существования ВВЗ мы можем также использовать модель Каллавэя. В низкотемпературной области в модели Каллавэя для описания экспериментальных данных по теплопроводности LiF в работе [6] используются следующие фононные частоты столкновений, вызванные нормальными процессами и процессами переброса:

$$\begin{aligned} \nu_N &= 2,7 \cdot 10^{-10} \omega T^3 \text{ с}^{-1} \\ \nu_U &= 600 x^2 T^4 e^{-170/T} \text{ с}^{-1}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $x = \hbar\omega/k_B T$.

Проведя процедуру усреднения по правилу

$$\langle f(x) \rangle = \int_0^\infty \frac{x^4 \exp[x]}{(\exp[x]-1)^2} f(x) dx \Big/ \int_0^\infty \frac{x^4 \exp[x]}{(\exp[x]-1)^2} dx \quad (15)$$

мы получим следующее выражение для усредненной частоты нормальных фононных столкновений:

$$\nu_N = 167,66 \cdot T^4 \quad (16)$$

Частоты процессов рассеяния на изотопах и границе имеют вид (6), (7). За счет процессов переброса в числителе формулы (15) для усреднения частоты столкновений необходимо принять конечные пределы интегрирования. Это связано с тем фактом, что входящая в ν_U частота фона порядка дебаевской. Величину ее изменения можно определить из законов сохранения. Для процессов $l + t \leftrightarrow l + b_g$ пределы равны

$$X_1 = \frac{\pi \hbar (1 - \beta) V_l}{2 a k_B T}, \quad X_2 = \frac{\pi \hbar V_l}{a k_B T}.$$

$$\nu_U = 23 \cdot T^4 e^{-170/T} \int_{X_1}^{X_2} x^6 e^{-x} dx. \quad (17)$$

Подставляя соответствующие выражения для частот из формул (6), (7), (16) и (17) в (11) мы получим условия для концентрации изотопов, размера и температуры в модели Каллавэя.

$$C_{iso} \leq 10 \cdot T^{-4} D^{-1} - 5,4 \cdot 10^5 D^{-2} T^{-8} - e^{-253/T} (2,28 \cdot 10^8 T^{-2} + 1,65 \cdot 10^6 T^{-1} + 10^6 + 4,8 \cdot 10^4 T + 1,7 \cdot 10^3 T^2 + 42 T^3). \quad (18)$$

Область существования ВВЗ в модели Каллавэя изображена на рис. 2.

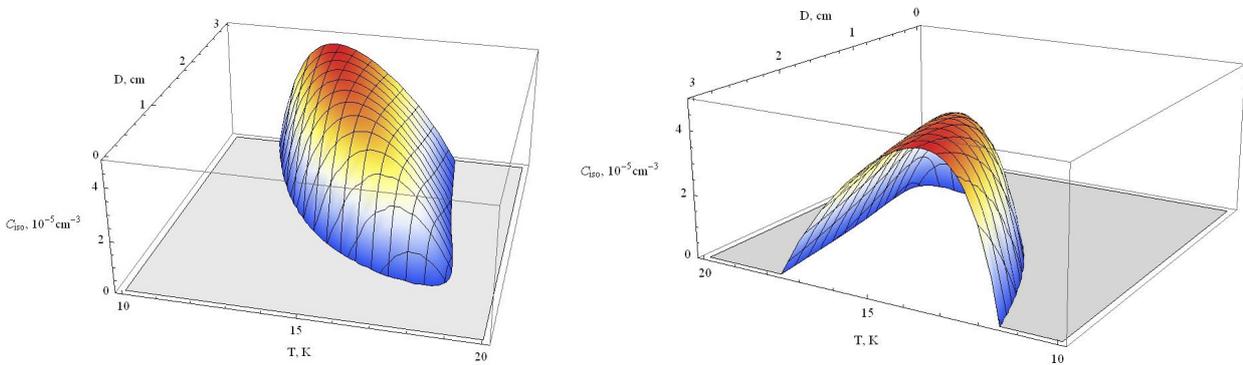


Рис. 2. Область существования ВВЗ в модели Каллавэя находится внутри объема ограниченного поверхностью.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проведем анализ полученных результатов, используя графики приведенные на рис. 1,2. В обоих случаях максимальное окно существования ВВЗ будет при нулевой концентрации изотопа ${}^6\text{Li}$. С увеличением концентрации область существования уменьшается до нуля при концентрациях $2,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ и выше. Из общего вида этих графиков следует такое ограничение на размер образца: он не должны быть меньше 0,8 см. Максимальная величина допустимой концентрации изотопов для данных размера и температуры на рис. 1,2 совпадает по порядку величины, но в модели приведенного изотропного кристалла эта величина меньше в 2 раза и температурное окно сдвинуто в область более высоких температур на 1 градус. Область наиболее вероятного наблюдения ВВЗ в кристалле будет находиться на пересечении областей ограниченных соответствующими поверхностями. Проиллюстрируем эти особенности на следующих примерах.

На рис. 3 приведена зависимость концентрации изотопов от температуры для двух размеров образца $D = 1 \text{ см}$ и $D = 3 \text{ см}$. Действительно, с увеличением размера образца температурная область наиболее вероятного существования увеличивается с 1,5 до 4 К и сдвигается в область более низких температур, а максимальная допустимая концентрация возрастает с $1,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ до $2,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$.

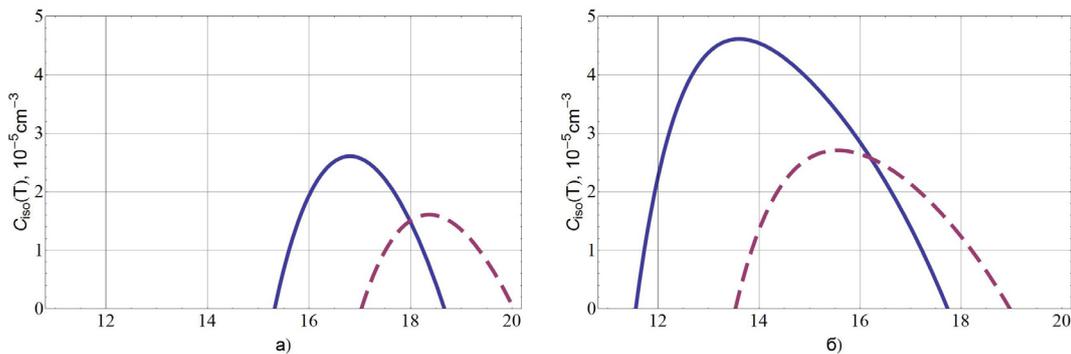


Рис.3. Область существования ВВЗ при фиксированном размере образца D.

Пунктирная линия – модель приведенного изотропного кристалла; сплошная – модель Каллавэя. а) $D = 1 \text{ см}$; б) $D = 3 \text{ см}$.

На рис. 4 приведены графики зависимости размеров образца от температуры при заданной концентрации изотопов ${}^6\text{Li}$ равной 10^{-5} см^{-3} . При этом видно, что минимальный размер образца, в котором возможно распространение ВВЗ, ограничен 0,8 см. С увеличением размера образца температурная область увеличивается и сдвигается в область более низких температур. Для образца с размерами 1,5 см она составляет 2 К, а для образца с размером 3 см – порядка 3 К.

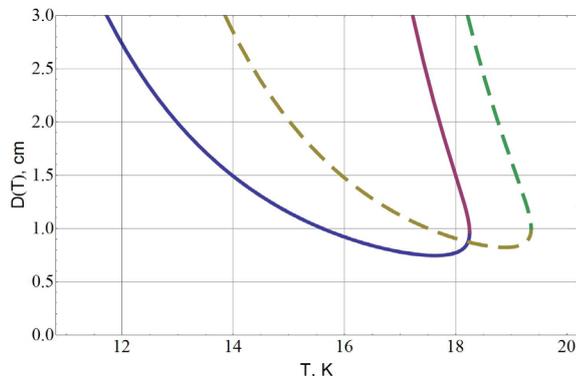


Рис.4. Область существования ВВЗ при фиксированной концентрации изотопов ${}^6\text{Li}$. Пунктирная – модель приведенного изотропного кристалла; сплошная – модель Каллауэя.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты данной работы позволяют подобрать наиболее оптимальные параметры, необходимые для экспериментального обнаружения волн второго звука в монокристаллах фторида лития, основываясь на сравнении проведенных расчетов в двух различных моделях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Peshkov V. // International Conference Fundamental Particles and how Temperatures. – Cavendish Laboratory, London, 1946. – P. 19.
2. Ward J.C., Wilks J. Second sound and thermodynamical effect at very low temperatures // *Phylos. Mag.* – 1952. – Vol. 43. – No.336. – P.48-50.
3. Dingle R.B. The velocity of second sound in various media // *Proc. Soc. London.* – 1952. - Vol.65. – No. 396. - P. 1044-1050.
4. Prohovsky E.W., Krumhansl I.A. Second-sound propagation in dielectric solids // *Phys. Rev.* – 1964. - Vol.A 133. - P.1403-1410.
5. Guyer R.A., Krumhansl I.A. Dispersion relation for second sound in solids // *Phys. Rev.* - 1964. - Vol.A 133. - P.1411-1417.
6. Berman R. *Thermal Conduction in Solids.* – Oxford: Clarendon Press, 1976. – 286 p.
7. Callaway J. Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures // *Phys. Rev.* – 1959. –Vol. 113. –P. 1046.
8. Zhernov A.P., Inyushkin A.V. Kinetic coefficients in isotopically disordered crystals // *Physics-Uspokhi (Advances in Physical Sciences).* – 2002. - Vol. 172. - P. 573.
9. Ackerman S.S., Bertman B., Fairbank H.A., Guyer R.A. Second sound in solid helium // *Phys. Rev. Lett.* – 1969. – Vol. 16. – P. 789-801.
10. McNelly T.F., Rogers S.J., Chanin D.J., Rollefson R.J., Goubau W.M., Schmidt G.E., Krumhansl I.A., Pohl R.O. Heat pulses in NaF: onset of second sound // *Phys. Rev. Lett.* - 1970. - Vol.24. - P. 100-116.
11. Narayanamurti V., Dynes R.C. Observation of second sound in bismuth // *Phys. Rev. Lett.* - 1972. - Vol.28. - P. 1401.
12. Danilichenko B.A., Poroshin V.N., Sarbej O.G. Second sound observation in sapphire // *JETP Letters.* – 1970. –Vol.30. – P. 215.
13. Akhiezer A.I., Aleksin V.F., Khodusov V.D. Gas dynamic of quasi-particles // *LTP.* – 1994. – Vol.20. – P.1199. – Vol. 21. – P.1995.
14. Gurzhi R.N. Hydrodynamic coefficients in solids at low temperatures // *Soviet Physics-Uspokhi.* – 1968. – Vol.94. – P. 689-718.
15. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Second sound waves in diamond // *Diamond & Related Materials* – 2012. – Vol. 21. – P.92-98.
16. Aleksin V.F., Khodusov V.D. Hydrodynamical fluctuation in the quasi-particle gas // *LTP.* –2001. –Vol.27. – No.3. –P.309-315.

PACS: 05.20.-y; 05.20.Gg; 05.70.Ce; 64.10.+h

METHOD OF CORRELATION FUNCTIONS FOR DENSE GASES AND LIQUIDS**Yu.M. Poluektov***National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"**1, Akademicheskaya Str., 61108 Kharkov, Ukraine**E-mail: yuripoluektov@kipt.kharkov.ua*

Received June 3, 2015

The method of correlation functions for classical equilibrium many-particle systems, which accounts for a mean self-consistent field acting on each particle, has been formulated in the grand canonical ensemble representation. Inclusion of the self-consistent field effects into the formalism of correlation functions enables to describe systems in which the concentration of particles is not low. The account for the mean field is important for gases and liquids, where some notions used in the theory of rarefied gases lose their meaning, for example the mean free pass and pair collisions. The equation for the self-consistent field and the distribution function for arbitrary configuration energy is obtained from the requirement of minimum of the thermodynamic potential and it is shown that, if correctly formulated, the self-consistent field model leads to correct thermodynamic relations. The perturbation theory is constructed, based on the choice of the self-consistent field model as the main approximation. Thermodynamic functions, the heat capacities, the speed of sound and compressibility for a spatially homogeneous medium are calculated in the framework of the self-consistent field model for the pair interparticle interaction, as well as the main corrections to these quantities

KEY WORDS: distribution function, correlation function, self-consistent field, configuration energy, perturbation theory**МЕТОД КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ПЛОТНЫХ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ****Ю.М. Полуэктов***Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"**61108, Академическая, 1, Харьков, Украина*

В представлении большого канонического ансамбля сформулирован метод корреляционных функций для классических равновесных многочастичных систем, учитывающий среднее самосогласованное поле, действующее на каждую частицу. Включение в формализм корреляционных функций эффектов самосогласованного поля позволяет описывать системы, плотность числа частиц в которых не является малой. Учет среднего поля важен в плотных газах и жидкостях, где теряют смысл некоторые понятия, используемые в теории разреженных газов, например, длина свободного пробега и парные столкновения. Из условия минимума термодинамического потенциала, получено уравнение для самосогласованного поля и функции распределения при произвольной конфигурационной энергии и показано, что при корректной формулировке модель самосогласованного поля приводит к правильным термодинамическим соотношениям. Построена теория возмущений, основанная на выборе в качестве главного приближения модели самосогласованного поля. Вычислены термодинамические функции, теплоемкости, скорость звука и сжимаемость для пространственно-однородной среды в модели самосогласованного поля при парном межчастичном взаимодействии, а также главные поправки к этим величинам.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: функция распределения, корреляционная функция, самосогласованное поле, конфигурационная энергия, теория возмущений**МЕТОД КОРРЕЛЯЦІЙНИХ ФУНКЦІЙ ДЛЯ ГУСТИХ ГАЗІВ І РІДИН****Ю.М. Полуэктов***Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"**61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна*

У представленні великого канонічного ансамблю сформульовано метод кореляційних функцій для класичних рівноважних багаточастинкових систем, що враховує середнє самоузгоджене поле, яке діє на кожну частинку. Включення у формалізм кореляційних функцій ефектів самоузгодженого поля дозволяє описувати системи, густина числа частинок у яких не є малою. Урахування середнього поля важливе у густих газах і рідинах, де втрачають зміст деякі поняття, що використовуються в теорії розріджених газів, наприклад, довжина вільного пробігу і парні зіткнення. З умови мінімуму термодинамічного потенціалу, отримане рівняння для самоузгодженого поля і функції розподілу при довільній конфігураційній енергії і показано, що при коректному формулюванні модель самоузгодженого поля приводить до правильних термодинамічних співвідношень. Побудовано теорію збурень, яка заснована на виборі у якості головного наближення моделі самоузгодженого поля. Обчислено термодинамічні функції, теплоємності, швидкість звуку і стискальність для просторово-однорідного середовища в моделі самоузгодженого поля при парній міжчастинковій взаємодії, а також головні поправки до цих величин.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: функція розподілу, кореляційна функція, самоузгоджене поле, конфігураційна енергія, теорія збурень

Вследствие того, что система большого числа частиц при малой плотности является наиболее простой для теоретического описания, исторически статистическая физика строилась на примере модели разреженного газа [1]. Изучение классических многочастичных систем на основе рассмотрения корреляционных функций для групп молекул начало развиваться, начиная с 30-х годов прошлого века в работах Ивона, Борна и Грина, Кирквуда (см. [2]). Метод корреляционных функций систематически сформулирован в известной монографии Боголюбова [3]. В сравнении с достаточно хорошо развитой теорией разреженных газов, теория плотных сред,

таких как жидкости и плотные газы, продолжает заметно отставать в своем развитии. Непосредственное применение к теории жидкого состояния формализма корреляционных функций, развитого в упомянутых работах [4], не позволяет количественно описывать плотные системы.

В отличие от разреженных газов, где взаимодействие между молекулами происходит только во время столкновения, а в остальном их движение можно рассматривать как свободное, в плотных системах взаимодействие между молекулами осуществляется постоянно. Поэтому в жидкостях теряют смысл многие понятия теории газов, например, такие как длина свободного пробега и парные столкновения. Здесь отдельная молекула все время находится в поле действия сил других молекул, поэтому более адекватное описание такой ситуации может быть проведено с помощью представления о среднем поле, действующем на выделенную молекулу со стороны частиц ее окружающих.

Понятие среднего молекулярного поля было введено в физику Вейссом (см. [5]) в классической теории ферромагнетизма. В квантовой механике идея среднего самосогласованного поля для приближенного решения уравнения Шредингера многоэлектронной системы была использована Хартри [6] и впоследствии обобщена Фоком [7] и Боголюбовым [8].

Приближение самосогласованного поля для описания кинетических процессов в плазме впервые использовано Власовым [9]. В дальнейшем метод самосогласованного поля был распространен Власовым для описания классических систем большого числа частиц, взаимодействующих посредством короткодействующих сил, в частности для построения теории кристаллического упорядочения конденсированной среды [10]. Распространение идеи самосогласованного поля на случай систем многих частиц с короткодействующим взаимодействием вызвало резкую критику некоторых ведущих физиков [11]. Ответ Власова на критику, высказанную в указанной работе, дан в его подробной статье [12].

Хотя возникшая дискуссия носила, безусловно, чисто научный характер, но негативное отношение к модели самосогласованного поля, как универсальному методу исследования многочастичных систем, ряда выдающихся физиков и ограничение области его применимости только системами частиц с кулоновским взаимодействием, существенно затормозило развитие этого фундаментального для теории многочастичных систем подхода. Особенно это коснулось теории многочастичных систем, описываемых классической механикой, в частности теории классических жидкостей.

Между тем в теории квантовых объектов метод самосогласованного поля продолжал развиваться и широко использоваться. Достаточно отметить, что теория нормальной ферми-жидкости [13], обобщенная впоследствии на ферми- и бозе- системы с нарушенной фазовой симметрией [14], теория сверхпроводимости БКШ [15], а также теория неоднородного сверхтекучего бозе-газа Гросса-Питаевского [16,17], которая в настоящее время широко применяется для исследования атомарных бозе-эйнштейновских конденсатов [18,19], являются вариантами теории самосогласованного поля. Метод самосогласованного поля успешно применяется для расчетов структуры атомных ядер, где взаимодействие между нуклонами осуществляется посредством короткодействующих сил [20-22].

Исследования кристаллического состояния, основанные на идее самосогласованного поля, с учетом малости области движения атомов в узлах решетки, были продолжены Базаровым и его сотрудниками [23]. Ими же, в рамках обсуждаемого подхода, изучались фазовые переходы между различными модификациями кристаллов с учетом многочастичных взаимодействий [24]. Однако, авторами развиваемого подхода, без достаточных, на наш взгляд на то оснований, высказывается утверждение о неприменимости приближения самосогласованного поля для жидкости и газа (см. [23, §6]). Это, в частности, означает, что, по их мнению, метод самосогласованного поля неприменим для описания кристаллизации и плавления. Очевидно, что теория, которая описывает, состояние с нарушенной трансляционной симметрией, но неприменима для описания симметричного пространственно-однородного состояния, не может считаться последовательной.

Многолетнее развитие метода самосогласованного поля убедительно показало, что он является эффективным приближением для описания систем большого числа частиц, как в квантовом, так и классическом случае, даже при условии, когда взаимодействие между частицами короткодействующее и его нельзя считать слабым, а плотность системы малой. Эта модель применима как к системам с конечным числом частиц, таким как атомные ядра [20-22] или электронные оболочки атомов и молекул [6,25], так и к многочастичным системам при их описании методами статистической физики. Метод самосогласованного поля особенно полезен при исследовании пространственно - неоднородных систем, и его использование принципиально важно в теории фазовых переходов [26,27]. Модель самосогласованного поля также служит эффективным главным приближением при построении теории возмущений, в том числе для пространственно-неоднородных систем [28] и многочастичных систем с нарушенными симметриями [29-32].

Приближение среднего или самосогласованного поля может быть введено различными способами, и, соответственно, возможны различные варианты этого приближения. В большинстве случаев такое приближение вводят на уровне уравнений движения. При описании в рамках подхода самосогласованного поля квантовых многоэлектронных [6,7,33] и многонуклонных систем [20-22] обычно, с учетом симметрии, выбирают пробную волновую функцию, построенную из одночастичных волновых функций, для которых получают уравнение Шредингера с самосогласованным потенциалом, зависящим от состояния всех частиц. В методе операторных

уравнений движения в представлении вторичного квантования в произведениях операторов некоторые операторы заменяют их средними, линеаризуя уравнений движения [20]. В теории классических кинетических уравнений переход к приближению среднего поля осуществляется заменой бинарной функции распределения на произведение двух одночастичных функций [2,3].

При статистическом описании многочастичных систем модель самосогласованного поля наиболее последовательно в самой общей форме удобно вводить не на уровне уравнений движения, а на уровне гамильтониана. Это позволяет естественно получить не только самосогласованные уравнения движения, но и построить термодинамику многочастичной системы. С этой целью точный гамильтониан разбивается на сумму аппроксимирующего гамильтониана и остаточного корреляционного гамильтониана. Аппроксимирующий (или самосогласованный) гамильтониан выбирается в виде квадратичной операторной формы наиболее общего вида, которая содержит неопределенные на начальном этапе поля. Такой гамильтониан, описывающий в модели самосогласованного поля систему многих частиц, может быть приведен к диагональному виду, а входящие в него поля могут быть определены из вариационного принципа. В рамках такого описания в микроскопическом подходе естественно возникает концепция квазичастиц. Эффекты, связанные со взаимодействием квазичастиц, которые описываются корреляционным гамильтонианом, учитываются по теории возмущений. Если строить модель самосогласованного поля так, чтобы уже в этом приближении выполнялись все термодинамические соотношения, как, например, это имеет место для идеальных квантовых газов [34], то все параметры такой модели определяются однозначно. Описанная программа в общем виде для ферми-систем реализована в [29,30], а для бозе-систем - в [31,32,35]. Следует отметить, что данный подход является столь общим, что может быть также использован для последовательного описания релятивистских квантовых полей с нарушенными симметриями [36,37].

Целью данной работы является развитие метода корреляционных функций для классических систем большого числа частиц, в котором учитывается среднее самосогласованное поле, действующее на выделенную частицу. Предлагаемая формулировка модели самосогласованного поля в представлении большого канонического ансамбля для систем большого числа частиц, чья динамика описывается классической механикой, аналогична методу введения самосогласованного поля, развитому ранее для квантовых систем [29-32]. Учет в развитом формализме самосогласованного поля дает принципиальную возможность описывать системы, плотность числа частиц в которых не является малой, такие как плотные газы и жидкости. Из условия минимума термодинамического потенциала, получено уравнение для самосогласованного поля и функции распределения при произвольной конфигурационной энергии и показано, что при корректной формулировке модель самосогласованного поля приводит к правильным термодинамическим соотношениям. Рассчитаны термодинамические функции, теплоемкости, скорость звука и сжимаемость для однородной среды в модели самосогласованного поля при парном межчастичном взаимодействии, а также главные поправки к этим величинам. Построена теория возмущений, основанная на выборе в качестве основного приближения модели самосогласованного поля.

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ БОЛЬШОГО КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ

Описание равновесных свойств многочастичной системы с помощью корреляционных функций, как правило, проводится с использованием канонического ансамбля [3,4]. В этом случае рассматривается система с фиксированным числом N одинаковых частиц в объеме V при данной температуре T . Между тем, для описания пространственно-неоднородных систем и фазовых переходов в них, удобнее пользоваться большим каноническим ансамблем (БКА). Тогда предполагают, что система может обмениваться с термостатом не только энергией, но и частицами, так что число частиц в рассматриваемой системе не является фиксированным, а в качестве независимых термодинамических переменных выбираются температура T и химический потенциал μ . Метод корреляционных функций в представлении БКА использовался, например, в работах [38,39]. Однако, поскольку автору неизвестно, где бы этот метод систематически излагался, а его использование существенно для дальнейшего построения статистической теории плотных систем, то в данном разделе будет сформулирован метод корреляционных функций для БКА достаточно подробно.

Согласно Гиббсу [3,34], вероятность обнаружить систему из N одинаковых молекул с массой m в состоянии с набором координат $q_N \equiv (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ есть

$$D(q_N) = \frac{\exp[-\beta U(q_N)]}{Q_N}. \quad (1)$$

Здесь $U(q_N)$ - потенциальная (конфигурационная) энергия, а

$$Q_N = \int \exp[-\beta U(q_N)] dq_N \quad (2)$$

- конфигурационный интеграл, $\beta = 1/T$ - обратная температура, $dq_N \equiv d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N$. В дальнейшем для краткости, там где это не может вызвать недоразумения, будем также пользоваться обозначениями $q_N \equiv q$ и $dq_N \equiv dq$. Статистическая сумма, через которую выражается свободная энергия $F = -T \ln Z_N$, определяется соотношением

$$Z_N \equiv \frac{Q_N}{N! \Lambda^{3N}}, \quad (3)$$

причем

$$\Lambda \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi m T}} \quad (4)$$

- тепловая длина волны частицы, h - постоянная Планка. Классическое описание системы правомерно, если тепловая длина много меньше среднего расстояния между частицами $\Lambda \ll (V/N)^{1/3}$. При описании системы в представлении БКА большой термодинамический потенциал $\Omega = -T \ln Z_\mu$ выражается через статистическую сумму

$$Z_\mu = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_N. \quad (5)$$

Функция распределения для s молекул при полном числе их $N > s$ определяется соотношением [2,3]:

$$F_{sN}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) = V^s \int D(q_N) d\mathbf{q}_{s+1} \dots d\mathbf{q}_N. \quad (6)$$

В методе БКА полное число частиц не фиксировано, так что следует определить корреляционные функции для группы из s частиц так, чтобы они не зависели от полного числа частиц. Как будет видно, естественно определить корреляционные функции, не зависящие от полного числа частиц, формулой:

$$G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \equiv \sum_{N=s}^{\infty} L_N N(N-1) \dots (N-s+1) F_{sN}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s), \quad (7)$$

где использовано обозначение

$$L_N = \frac{e^{\beta \mu N} Z_N}{Z_\mu}, \quad (8)$$

причем $\sum_{N=0}^{\infty} L_N = 1$. Корреляционные функции (7) нормированы условием

$$\int G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s = V^s b(s), \quad (9)$$

где

$$b(s) \equiv \sum_{N=s}^{\infty} L_N N(N-1) \dots (N-s+1). \quad (10)$$

Естественность определения (7) становится очевидной при вычислении средних от величин типа

$$A_s(q_N) = \frac{1}{s!} \sum_{(i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_s = 1)}^N a(\mathbf{q}_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_s}). \quad (11)$$

Средние от таких величин вычисляются с помощью корреляционных функций (7) по формуле

$$\langle A_s \rangle = \frac{1}{s! V^s} \int a(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s. \quad (12)$$

В частности для наиболее важных случаев величин аддитивного и бинарного типов имеем:

$$\langle A_1 \rangle = \frac{1}{V} \int a(\mathbf{q}) G_1(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \quad (13)$$

$$\langle A_2 \rangle = \frac{1}{2V^2} \int a(\mathbf{q}, \mathbf{q}') G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q} d\mathbf{q}'.$$

Функция

$$\frac{G_1(\mathbf{q})}{V} \equiv n(\mathbf{q}) \quad (14)$$

имеет смысл средней плотности числа частиц, поскольку $\int n(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \langle N \rangle$.

Чтобы выяснять смысл функции $G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$, следует рассчитать величину среднего $\langle (\Delta N)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$, где $\Delta N = N - \langle N \rangle$. В результате получаем:

$$V^{-2} \int [G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - G_1(\mathbf{q})G_1(\mathbf{q}')] d\mathbf{q}d\mathbf{q}' = \langle (\Delta N)^2 \rangle - \langle N \rangle. \quad (15)$$

Парная корреляционная функция определяется соотношением:

$$g(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \equiv \frac{G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - G_1(\mathbf{q})G_1(\mathbf{q}')}{V}. \quad (16)$$

Из (15) и определения (16) получаем связь парной корреляционной функции с флуктуацией числа частиц:

$$\frac{1}{V \langle N \rangle} \int g(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q}d\mathbf{q}' = \frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{\langle N \rangle} - 1. \quad (17)$$

Связь между корреляционными функциями (7) высшего и низшего порядков более сложная, чем в каноническом ансамбле [2-4]. Используя формулу

$$\frac{\partial L_N}{\partial \mu} = \beta L_N (N - \langle N \rangle), \quad (18)$$

находим

$$T \frac{\partial G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s)}{\partial \mu} = \frac{1}{V} \int G_{s+1}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s, \mathbf{q}_{s+1}) d\mathbf{q}_{s+1} - (\langle N \rangle - s) G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s). \quad (19)$$

В частности, связь между одночастичной и бинарной функциями определяется уравнением

$$T \frac{\partial G_1(\mathbf{q})}{\partial \mu} = \frac{1}{V} \int G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q}' - (\langle N \rangle - 1) G_1(\mathbf{q}). \quad (20)$$

Энтропия в представлении БКА

$$S = - \sum_N \int w_N(p_N, q_N) \ln w_N(p_N, q_N) \frac{dp_N dq_N}{N! h^{3N}} \quad (21)$$

выражается через вероятность обнаружить систему в состоянии с числом частиц N с набором импульсов $p_N \equiv (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ и координат $q_N \equiv (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$

$$w_N(p_N, q_N) = \exp \beta [\Omega - H_N(p_N, q_N) + \mu N], \quad (22)$$

где гамильтониан определен формулой:

$$H_N(p_N, q_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(q_N). \quad (23)$$

С учетом определения (21) получаем $\Omega = E - TS - \mu \langle N \rangle$, что совпадает с термодинамическим соотношением. Энтропия (21) может быть записана в виде

$$S = \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu}{T} \right) \langle N \rangle + \frac{\langle U(q_N) \rangle}{T} + \ln Z_\mu. \quad (24)$$

Полная энергия $E = \langle H \rangle$, которая является суммой кинетической и потенциальной энергий, дается формулой

$$E = \frac{3}{2} T \langle N \rangle + \langle U(q_N) \rangle, \quad (25)$$

где

$$\langle U(q_N) \rangle = \sum_N L_N \int D(q_N) U(q_N) dq_N. \quad (26)$$

Нетрудно проверить, что выполнено термодинамическое тождество $d\Omega = -\langle N \rangle d\mu - SdT$. Среднее число частиц находится по формуле

$$\langle N \rangle = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{T}{Z_\mu} \frac{\partial Z_\mu}{\partial \mu}. \quad (27)$$

В пространственно-однородном случае давление определяется через термодинамический потенциал

$$p = - \frac{\Omega}{V} = \frac{T}{V} \ln Z_\mu. \quad (28)$$

Формула (27) задает среднее число частиц $\langle n \rangle = \langle N \rangle / V$ как функцию химического потенциала и температуры, а формула (28) – давление, как функцию химического потенциала и температуры. Совместно оба эти уравнения параметрически определяют давление как функцию средней плотности и температуры. Отметим, что расчет давления при использовании канонического ансамбля даже при учете только парных взаимодействий довольно сложен [3,4]. Отметим также, что выражение для давления (28) в БКА пригодно при произвольных, а не только парных, взаимодействиях.

Правая часть важной формулы (17) для бинарной корреляционной функции может быть выражена через термодинамические функции. Поскольку

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad \langle N^2 \rangle = -T \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)^2 = T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} + \langle N \rangle^2, \quad (29)$$

то получаем

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}. \quad (30)$$

Воспользовавшись термодинамическим соотношением

$$\left(\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial p} \right)_{T,V} \frac{\langle N \rangle}{V}, \quad (31)$$

где было учтено, что $(\partial p / \partial \mu)_{T,V} = -V^{-1} (\partial \Omega / \partial \mu)_{T,V} = \langle N \rangle / V$, находим известную формулу Орнштейна и Цернике [40,41]

$$\frac{1}{V \langle N \rangle} \int g(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q} d\mathbf{q}' = T \left(\frac{\partial \langle n \rangle}{\partial p} \right)_T - 1, \quad (32)$$

связывающую бинарную корреляционную функцию с изотермической сжимаемостью.

МЕТОД ВАРИАЦИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ В БКА

Использование метода вариационных производных может оказаться очень удобным, особенно для получения общих соотношений [38]. В данном разделе найдем вариационные производные термодинамического потенциала и функций распределения, а также получим важное соотношение для бинарной функции, которое используется в рамках метода интегральных уравнений в статистической теории жидкостей [39].

Конфигурационная энергия может быть представлена в виде суммы энергии частиц во внешнем поле и энергии межчастичного взаимодействия

$$U(q) = U_0(q) + U_I(q), \quad (33)$$

где $U_0(q) = \sum_{i=1}^N U_0(\mathbf{q}_i)$, а $U_0(\mathbf{q})$ - энергия одной частицы во внешнем поле. При наличии внешнего поля большой термодинамический потенциал является функционалом от энергий $U_0(\mathbf{q}_i)$. Даже в случаях, когда реальные внешние поля отсутствуют, при получении общих соотношений удобно ввести некоторые фиктивные внешние поля, с тем, чтобы в конечных выражениях положить их равными нулю.

Пусть вариация конфигурационной энергии (33)

$$\delta U(q) = \delta U_0(q) = \sum_{i=1}^N \delta U_0(\mathbf{q}_i). \quad (34)$$

Тогда вариация термодинамического потенциала есть $\delta \Omega = -T (\delta Z_\mu / Z_\mu)$, причем $\delta Z_\mu = \delta Q_N / N! \Lambda^{3N}$, а вариация конфигурационного интеграла

$$\delta Q_N = -\beta N \int \delta U_0(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \int \exp[-\beta U(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)] d\mathbf{q}_2 \dots d\mathbf{q}_N, \quad (35)$$

так что вариационная производная:

$$\begin{aligned} \frac{\delta Q_N}{\delta U_0(\mathbf{q})} &= -\beta N \int \exp[-\beta U(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)] d\mathbf{q}_2 \dots d\mathbf{q}_N = \\ &= -\beta N Q_N \int D(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) d\mathbf{q}_2 \dots d\mathbf{q}_N = -\beta \frac{N}{V} Q_N F_{1N}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (36)$$

Принимая во внимание (36), находим:

$$\frac{\delta Z_N}{\delta U_0(\mathbf{q})} = -\beta Z_N \frac{N}{V} F_{N1}(\mathbf{q}), \quad \frac{\delta Z_\mu}{\delta U_0(\mathbf{q})} = -\beta \frac{Z_\mu}{V} G_1(\mathbf{q}). \quad (37)$$

В итоге получаем что вариационная производная от термодинамического потенциала по внешнему полю равна плотности:

$$\frac{\delta \Omega}{\delta U_0(\mathbf{q})} = -\frac{T}{Z_\mu} \frac{\delta Z_\mu}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \frac{G_1(\mathbf{q})}{V} = n(\mathbf{q}). \quad (38)$$

Найдем вариационные производные от корреляционных функций в БКА (7). Для этого примем во внимание соотношения

$$\frac{\delta L_N}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \beta L_N \left[\frac{G_1(\mathbf{q})}{V} - \frac{N}{V} F_{1N}(\mathbf{q}) \right], \quad (39)$$

$$\frac{\delta D(q)}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \beta D(q) \left[\frac{N}{V} F_{1N}(\mathbf{q}) - \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) \right]. \quad (40)$$

Тогда имеем:

$$\frac{\delta F_{sN}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s)}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \beta F_{sN}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \left[\frac{N}{V} F_{1N}(\mathbf{q}) - \sum_{i=1}^s \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) \right] - \beta \frac{(N-s)}{V} F_{s+1N}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s, \mathbf{q}). \quad (41)$$

Отсюда для функций распределения в БКА (7) находим вариационную производную:

$$T \frac{\delta G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s)}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \left[\frac{G_1(\mathbf{q})}{V} - \sum_{i=1}^s \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) \right] G_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) - \frac{1}{V} G_{s+1}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s, \mathbf{q}). \quad (42)$$

В частности:

$$T \frac{\delta G_1(\mathbf{q}_1)}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \left[\frac{G_1(\mathbf{q})}{V} - \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) \right] G_1(\mathbf{q}_1) - \frac{1}{V} G_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}), \quad (43)$$

$$T \frac{\delta G_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)}{\delta U_0(\mathbf{q})} = \left[\frac{G_1(\mathbf{q})}{V} - \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) - \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_2) \right] G_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) - \frac{1}{V} G_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}).$$

Найдем вторую вариационную производную от термодинамического потенциала. Поскольку

$$\delta^2 \Omega = -T \frac{\delta^2 Z_\mu}{Z_\mu} + T \left(\frac{\delta Z_\mu}{Z_\mu} \right)^2, \quad (44)$$

то следует вычислить вторую вариацию $\delta^2 Z_\mu$, которая имеет вид

$$\frac{\delta^2 Z_\mu}{\delta U_0(\mathbf{q}) \delta U_0(\mathbf{q}')} = \frac{\beta^2 Z_\mu}{V} \left[\frac{G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}')}{V} + \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') G_1(\mathbf{q}) \right]. \quad (45)$$

В итоге получаем, что вторая производная термодинамического потенциала выражается через бинарную корреляционную функцию (16) и плотность:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 \Omega}{\delta U_0(\mathbf{q}) \delta U_0(\mathbf{q}')} &= \frac{1}{V} \frac{\delta G_1(\mathbf{q}')}{\delta U_0(\mathbf{q})} = -\frac{\beta}{V^2} [G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - G_1(\mathbf{q}) G_1(\mathbf{q}')] - \frac{\beta}{V} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') G_1(\mathbf{q}) = \\ &= -\frac{\beta}{V} g(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - \beta \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') n(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (46)$$

Используя вариационный метод, можно определить так называемую прямую корреляционную функцию [40,41] и получить важное интегральное уравнение, которое успешно используется для описания свойств жидкостей [38,39]. Для получения искомого уравнения будем исходить из очевидного соотношения

$$\int \frac{\delta G_1(\mathbf{q})}{\delta U_0(\mathbf{q}')} \frac{\delta U_0(\mathbf{q}'')}{\delta G_1(\mathbf{q}')} d\mathbf{q}'' = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (47)$$

Поскольку прямая вариационная производная (43) содержит дельта - функцию, то, оказывается, удобно выделить слагаемое с дельта - функцией и в обратной производной, представив ее в виде

$$T \frac{\delta U_0(\mathbf{q}'')}{\delta G_1(\mathbf{q}')} = \frac{A(\mathbf{q}'', \mathbf{q}')}{V} - \frac{1}{G_1(\mathbf{q}')} \delta(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}'). \quad (48)$$

Вместо вариационной производной $\delta U_0(\mathbf{q})/\delta G_1(\mathbf{q}')$ это соотношение вводит новую функцию $A(\mathbf{q}'', \mathbf{q}')$, называемую прямой корреляционной функцией. Подстановка (48) в (47) приводит к интегральному уравнению

$$G_1(\mathbf{q}) G_1(\mathbf{q}') A(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \underline{G}_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - \frac{G_1(\mathbf{q}')}{V} \int \underline{G}_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}'') A(\mathbf{q}'', \mathbf{q}') d\mathbf{q}'', \quad (49)$$

где $\underline{G}_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}) = G_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}) - G_1(\mathbf{q}_1) G_1(\mathbf{q}) = Vg(\mathbf{q}_1, \mathbf{q})$.

В пространственно-однородном состоянии $G_1(\mathbf{q}) = Vn$ и $G_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = G_2(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)$, так что в этом случае

$$g(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \equiv \frac{G_2(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)}{V} - Vn^2. \quad (50)$$

Введя обозначение

$$h(|\mathbf{q}|) = \frac{g(|\mathbf{q}|)}{Vn^2} = \frac{G_2(|\mathbf{q}|)}{V^2n^2} - 1, \quad (51)$$

приходим к уравнению для прямой корреляционной функции:

$$A(|\mathbf{q}|) = h(|\mathbf{q}|) - n \int h(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) A(|\mathbf{q}'|) d\mathbf{q}', \quad (52)$$

которое было введено Орнштейном и Цернике из физических соображений [40,41]. Вывод этого уравнения на основе формализма вариационных производных в несколько иной форме приведен в [38,39]. Уравнение (52) является основой метода интегральных уравнений в статистической теории жидкостей. В него входит две неизвестных функции: $h(|\mathbf{q}|)$, связанная с бинарной корреляционной функцией соотношением (51), и $A(|\mathbf{q}|)$ - прямая корреляционная функция. Разумеется, одного уравнения (52) недостаточно для нахождения этих двух функций. Если, однако, из каких-либо физических соображений удастся установить связь между этими функциями, то, решая интегральное уравнение (52), можно найти неизвестную функцию. Одна из наиболее удачных аппроксимаций была предложена Перкусом и Йевиком [42]:

$$A(|\mathbf{q}|) = \frac{g(|\mathbf{q}|)}{Vn^2} [1 - \exp \beta U(|\mathbf{q}|)], \quad (53)$$

где $U(|\mathbf{q}|)$ - потенциальная энергия взаимодействия двух частиц. Оказалось, что уравнение Перкуса-Йевика имеет точное решение для потенциала твердых сфер [43]. Эффекты, обусловленные притягивающей частью потенциала межчастичного взаимодействия, могут быть учтены по теории возмущений, если потенциал твердых сфер рассматривать как главное приближение. Еще одной популярной аппроксимацией является уравнение сверхпереплетающихся цепей [39]:

$$A(|\mathbf{q}|) = \frac{g(|\mathbf{q}|)}{Vn^2} - \ln \frac{g(|\mathbf{q}|)}{Vn^2} - 1 - \beta U(|\mathbf{q}|). \quad (54)$$

Метод приближенных интегральных уравнений получил широкое распространение, и благодаря ему были достигнуты существенные успехи в теории равновесных свойств простых жидкостей. Недостатком указанного метода, в рамках которого получено вполне удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными, является его недостаточная теоретическая обоснованность и отсутствие регулярного способа построения приближенных интегральных уравнений. Более детальный вывод уравнения Перкуса-Йевика был предложен в работе [44].

МОДЕЛЬ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

В плотных газах и жидкостях теряют смысл некоторые понятия теории разряженных газов, например, такие как парные столкновения и длина свободного пробега. В силу этого попытки распространить подход, эффективный при описании, газов на плотные системы [4] встречается со значительными трудностями. В отличие от газов, где столкновения частиц редки, в жидкости отдельная частица постоянно находится как во внешнем поле, так и в некотором усредненном поле, создаваемом окружающими частицами. Метод самосогласованного поля позволяет естественным способом учесть это обстоятельство. Переход к приближению самосогласованного поля в кинетическом уравнении осуществляется путем замены бинарной функции распределения на произведение одночастичных функций распределения. В данной работе будем рассматривать только равновесные системы и формулировать модель самосогласованного поля так, чтобы уже в этом приближении выполнялись все термодинамические соотношения. Такой подход для квантовых ферми-систем был реализован в [29,30], а для бозе-систем в [31,32,35].

Чтобы учесть наличие среднего поля, действующего на выделенную частицу со стороны окружающих ее частиц, представим конфигурационную энергию в виде суммы двух слагаемых

$$U(q_N) = \underline{U}(q_N) + W(q_N), \quad (55)$$

где введена потенциальная энергия, включающая как потенциальную энергию частиц во внешнем поле, так и потенциальную энергию $\tilde{U}(\mathbf{q})$ частицы в поле, создаваемом всеми другими частицами:

$$\underline{U}(q) = U_0(q) + \tilde{U}(q) + E_0, \quad (56)$$

$$U_0(q) \equiv U_0(q_N) \equiv \sum_{i=1}^N U_0(\mathbf{q}_i), \quad \tilde{U}(q) \equiv \tilde{U}(q_N) \equiv \sum_{i=1}^N \tilde{U}(\mathbf{q}_i).$$

Разность между энергией взаимодействия частиц и потенциальной энергией в самосогласованном поле других частиц

$$W(q) = U_I(q) - \tilde{U}(q) - E_0 \quad (57)$$

называют корреляционной энергией. Самосогласованная потенциальная энергия одной частицы $\tilde{U}(\mathbf{q})$ и параметр E_0 , задающий уровень отсчета этой энергии, пока неизвестны и будут определены в дальнейшем.

Отметим, что уровень отсчета самосогласованной потенциальной энергии частицы не может быть произвольным, а должен определяться так, чтобы были выполнены все термодинамические соотношения.

Согласно (22) и (55), вероятность обнаружить систему N частиц в точке фазового пространства (p_N, q_N) записывается в виде

$$w_N(p, q) = \exp \beta \left[\Omega - \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \underline{U}(q) - W(q) + \mu N \right]. \quad (58)$$

Если в (58) пренебречь корреляционной энергией, то аналогичная вероятность в приближении самосогласованного поля определится формулой

$$\tilde{w}_N(p, q) = \exp \beta \left[\tilde{\Omega} - \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \underline{U}(q) + \mu N \right]. \quad (59)$$

Откуда следует, что вероятность обнаружить систему из N одинаковых молекул в состоянии с набором координат $q_N \equiv (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ в приближении самосогласованного поля дается формулой

$$\tilde{D}(q) = \frac{\exp[-\beta \underline{U}(q)]}{\tilde{Q}_N}, \quad (60)$$

где $\tilde{Q}_N = \int \exp[-\beta \underline{U}(q)] dq$. Вероятность (60) может быть представлена виде произведения одночастичных

функций распределения $\tilde{D}(q) = \prod_{i=1}^N \tilde{F}(\mathbf{q}_i)$, где одночастичная функции распределения в модели самосогласованного поля имеет вид

$$\tilde{F}(\mathbf{q}) = \tilde{z}^{-1} \exp \left\{ -\beta [U_0(\mathbf{q}) + \tilde{U}(\mathbf{q})] \right\}, \quad (61)$$

и нормирована условием

$$\int \tilde{F}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = V, \quad (62)$$

так что

$$\tilde{z} = V^{-1} \int \exp \left\{ -\beta [U_0(\mathbf{q}) + \tilde{U}(\mathbf{q})] \right\} d\mathbf{q}. \quad (63)$$

Параметр $\tilde{\Omega}$, входящий в (59), как будет видно, имеет смысл большого термодинамического потенциала в модели самосогласованного поля:

$$\tilde{\Omega} = E_0 - T \ln \tilde{Z}_\mu. \quad (64)$$

где

$$\tilde{Z}_\mu = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \tilde{Z}_N = \exp \left(e^{\beta \mu} \frac{\tilde{z} V}{\Lambda^3} \right). \quad (65)$$

причем здесь

$$\tilde{Z}_N = \frac{(\tilde{z} V)^N}{N! \Lambda^{3N}}. \quad (66)$$

В модели самосогласованного поля средние от величин (11) вычисляются с помощью одночастичной функции распределения (61):

$$\langle A_s \rangle_0 = \frac{\langle N \rangle_0^s}{V^s s!} \int a(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s. \quad (67)$$

Определенные в (7) корреляционные функции в модели самосогласованного поля также выражаются через произведение одночастичных функций распределения:

$$\tilde{G}_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \equiv \langle N \rangle_0^s \prod_{i=1}^s \tilde{F}(\mathbf{q}_i). \quad (68)$$

Среднее число частиц в данном приближении связано с химическим потенциалом соотношением

$$\langle N \rangle_0 = \frac{\tilde{z} V}{\Lambda^3} e^{\beta \mu}. \quad (69)$$

Покажем, что нормировочный параметр $\tilde{\Omega}$ в (59) действительно является большим термодинамическим потенциалом в модели самосогласованного поля, зная который можем определить все термодинамические характеристики системы. Энтропия в этом случае через вероятность (59) определяется известной формулой

$$\tilde{S} = - \sum_N \int \tilde{w}_N(p_N, q_N) \ln \tilde{w}_N(p_N, q_N) \frac{dp_N dq_N}{N! h^{3N}}. \quad (70)$$

С учетом (59) получаем правильное термодинамическое соотношение $\tilde{\Omega} = \tilde{E} - T\tilde{S} - \mu\langle N \rangle_0$, где полная энергия является суммой кинетической и потенциальной энергий $\tilde{E} = \tilde{K} + \langle \underline{U}(q) \rangle_0$, причем

$$\tilde{K} = \frac{3}{2}T\langle N \rangle_0, \quad \langle \underline{U}(q) \rangle_0 = E_0 + \frac{\langle N \rangle_0}{V} \int [U_0(\mathbf{q}) + \tilde{U}(\mathbf{q})] \tilde{F}(\mathbf{q}) d\mathbf{q}. \quad (71)$$

Используя определение (70) и выражение для вероятности (59), приходим к следующей формуле для энтропии в модели самосогласованного поля

$$\tilde{S} = \langle N \rangle_0 \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{T} \right) - \frac{\langle N \rangle_0}{V} \int \tilde{F}(\mathbf{q}) \ln \tilde{F}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} - \langle N \rangle_0 \ln \tilde{z}. \quad (72)$$

Второе слагаемое в (72) является поправкой к формуле Сакура – Тетроде [45] на пространственно-неоднородное самосогласованное поле.

УРАВНЕНИЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

До сих пор потенциальная энергия частицы в самосогласованном поле $\tilde{U}(\mathbf{q})$ и параметр E_0 , введенные соотношениями (56), (57), оставались не определенными. Энергию E_0 определим из естественного для теории самосогласованного поля требования, состоящего в том, чтобы среднее по распределению (60) от точной конфигурационной энергии было равно среднему от самосогласованной потенциальной энергии $\langle U(q) \rangle_0 = \langle \underline{U}(q) \rangle_0$. В результате получаем

$$E_0 = \langle U_I(q) \rangle_0 - \langle \tilde{U}(q) \rangle_0. \quad (73)$$

Таким образом, термодинамический потенциал (64) запишется в виде

$$\tilde{\Omega} = \langle U_I(q) \rangle_0 - \langle \tilde{U}(q) \rangle_0 - T \frac{\tilde{z}V}{\Lambda^3} e^{\beta\mu}. \quad (74)$$

Здесь средние по самосогласованному состоянию даются формулами:

$$\langle U_I(q) \rangle_0 = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^s}{V^s s!} \int U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s, \quad (75)$$

$$\langle \tilde{U}(q) \rangle_0 = \frac{\langle N \rangle_0}{V} \int \tilde{U}(\mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{q}) d\mathbf{q}. \quad (76)$$

Термодинамический потенциал (74) является функцией температуры и химического потенциала и функционалом от потенциала самосогласованного поля $\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}(T, \mu, \tilde{U}(\mathbf{q}))$. Уравнение, определяющее потенциал самосогласованное поле $\tilde{U}(\mathbf{q})$, найдем из требования равенства нулю вариации термодинамического потенциала по самосогласованному полю $\delta\tilde{\Omega} = 0$. Следует учесть, что вариация функции распределения связана с вариацией потенциала соотношением

$$\delta\tilde{F}(\mathbf{q}) = -\frac{\delta\tilde{z}}{\tilde{z}} \tilde{F}(\mathbf{q}) - \beta\tilde{F}(\mathbf{q})\delta\tilde{U}(\mathbf{q}), \quad (77)$$

причем

$$\frac{\delta\tilde{z}}{\tilde{z}} = -\frac{\beta}{V} \int \tilde{F}(\mathbf{q}) \delta\tilde{U}(\mathbf{q}) d\mathbf{q}. \quad (78)$$

С учетом, того что $\delta\langle N \rangle_0 / \langle N \rangle_0 = \delta\tilde{z} / \tilde{z}$, находим

$$\delta\tilde{U}(q) = -T\langle N \rangle_0 \frac{\delta\tilde{z}}{\tilde{z}} - \beta \frac{\langle N \rangle_0}{V} \int \tilde{U}(\mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{q}) \delta\tilde{U}(\mathbf{q}). \quad (79)$$

Вариация от энергии межчастичного взаимодействия:

$$\delta\langle U_I(q) \rangle_0 = -\beta \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^s}{V^s (s-1)!} \int U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \delta\tilde{U}(\mathbf{q}_1) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \tilde{F}(\mathbf{q}_2) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s. \quad (80)$$

Таким образом, вариация большого термодинамического потенциала записывается в виде

$$\delta\tilde{\Omega} = -\beta \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^s}{V^s (s-1)!} \int U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \delta\tilde{U}(\mathbf{q}_1) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \tilde{F}(\mathbf{q}_2) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s + \beta \frac{\langle N \rangle_0}{V} \int \tilde{U}(\mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{q}) \delta\tilde{U}(\mathbf{q}). \quad (81)$$

Приравнивая эту вариацию нулю, находим соотношение, определяющее потенциал самосогласованного поля с учетом многочастичных взаимодействий:

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^{s-1}}{V^{s-1} (s-1)!} \int U(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_s) \tilde{F}(\mathbf{q}_2) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_2 \dots d\mathbf{q}_s. \quad (82)$$

Принимая во внимание определение (73), находим

$$E_0 = - \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^s (s-1)}{V^s s!} \int U(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_s. \quad (83)$$

Следует подчеркнуть, что при получении формул (82) и (83) мы не использовали переход к термодинамическому пределу $V \rightarrow \infty$, $\langle N \rangle_0 \rightarrow \infty$ при $\langle N \rangle_0/V = \text{const}$. Поскольку функция распределения связана с потенциальной энергией самосогласованного поля $\tilde{F}(\mathbf{q}) = \tilde{z}^{-1} \exp\{-\beta[U_0(\mathbf{q}) + \tilde{U}(\mathbf{q})]\}$, то из (82) следуют интегральные уравнения, определяющие либо потенциальную энергию самосогласованного поля, действующего на частицу, либо функцию распределения. Так для функции распределения имеем интегральное уравнение

$$\begin{aligned} \ln \tilde{F}(\mathbf{q}) &= -\beta U_0(\mathbf{q}) - \ln \tilde{z} - \beta \sum_{s=2}^{\infty} \frac{\langle N \rangle_0^{s-1}}{V^{s-1} (s-1)!} \int U(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_s) \tilde{F}(\mathbf{q}_2) \dots \tilde{F}(\mathbf{q}_s) d\mathbf{q}_2 \dots d\mathbf{q}_s = \\ &= -\beta U_0(\mathbf{q}) - \ln \tilde{z} - \beta \langle n \rangle_0 \int U(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \tilde{F}(\mathbf{q}') d\mathbf{q}' - \frac{\beta \langle n \rangle_0^2}{2} \int U(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') \tilde{F}(\mathbf{q}') \tilde{F}(\mathbf{q}'') d\mathbf{q}' d\mathbf{q}'' - \dots, \end{aligned} \quad (84)$$

где $\langle n \rangle_0 \equiv \langle N \rangle_0/V$.

Выше были получены выражения для числа частиц (69) и энтропии (72) с помощью определения средних через вероятность (59). Было показано, что параметр $\tilde{\Omega}$, входящий в определение вероятности (59), имеет смысл большого термодинамического потенциала $\tilde{\Omega} = \tilde{E} - T\tilde{S} - \mu \langle N \rangle_0$. Чтобы убедиться в непротиворечивости модели самосогласованного поля, надо показать выполнимость термодинамических соотношений в рамках этой модели. Для этого необходимо убедиться, что число частиц и энтропия, найденные из термодинамических соотношений $\langle N \rangle_0 = -\partial \tilde{\Omega} / \partial \mu$ и $\tilde{S} = -\partial \tilde{\Omega} / \partial T$, совпадут с выражениями (69) и (72), полученными с помощью прямого усреднения. Это действительно так, поскольку самосогласованное поле было определено из условия $\delta \tilde{\Omega} / \delta \tilde{U}(\mathbf{q}) = 0$, так что при дифференцировании термодинамического потенциала не следует принимать во внимание зависимость от химического потенциала и температуры самосогласованной потенциальной энергии. Таким образом, вычисление энтропии и числа частиц как посредством усреднения с функцией распределения (59) так и с помощью термодинамических соотношений дает одинаковые результаты. При корректном выборе энергии E_0 каких-либо противоречий при статистическом описании систем в модели самосогласованного поля, о которых упоминается в [28], не возникает.

ТЕОРИЯ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ ДЛЯ ПАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Полученные в предыдущем разделе соотношения теории самосогласованного поля справедливы для конфигурационной энергии произвольного вида, учитывающей парные, трехчастичные и более высокие взаимодействия, которые могут быть существенными для плотных систем и давать не только количественный вклад в термодинамические величины, но приводить к качественно новым эффектам. Влияние трехчастичных сил на термодинамические свойства ферми-систем в рамках модели самосогласованного поля рассмотрено в [46].

Потенциальная энергия межчастичного взаимодействия может быть представлена в виде суммы парного, трехчастичного и более высоких взаимодействий: $U_l(q) = \sum_{s=2}^N U_l^{(s)}(q)$, где

$$U_l^{(s)}(q) = \frac{1}{s!} \sum_{(i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_s = 1)}^N U(\mathbf{q}_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_s}). \quad (85)$$

Чаще всего рассматривают взаимодействия, при которых потенциальная энергия зависит только от расстояния между частицами, и ограничиваются только парным взаимодействием $U(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)$. Вклад взаимодействий более высокого порядка, обычно, не рассматривается, хотя учет трехчастичных и высших взаимодействий продолжает оставаться актуальной проблемой статистической физики.

При учете только парных взаимодействий соотношения (82), (83) запишутся в виде

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \langle n \rangle_0 \int U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_1|) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) d\mathbf{q}_1, \quad (86)$$

$$E_0 = - \frac{\langle n \rangle_0^2}{2} \int U(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|) \tilde{F}(\mathbf{q}_1) \tilde{F}(\mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2. \quad (87)$$

а уравнения для функции распределения и самосогласованного поля принимают вид

$$\ln \tilde{F}(\mathbf{q}) = -\beta U_0(\mathbf{q}) - \ln \tilde{z} - \beta \langle n \rangle_0 \int U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \tilde{F}(\mathbf{q}') d\mathbf{q}', \quad (88)$$

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{\beta}{\tilde{z}} \langle n \rangle_0 \int U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \exp\{-\beta[U_0(\mathbf{q}') + \tilde{U}(\mathbf{q}')]\} d\mathbf{q}', \quad (89)$$

где $\tilde{z} = V^{-1} \int \exp\{-\beta[U_0(\mathbf{q}) + \tilde{U}(\mathbf{q})]\} d\mathbf{q}$. Аналогичные уравнения использовались вначале Власовым [10,12], а позже в работах [23,24], для построения теории кристаллического состояния.

Особенно простой вид соотношения приобретают в отсутствие внешнего поля в пространственно-однородном случае. Тогда $\tilde{F}(\mathbf{q}) = 1$, $\tilde{z} = \exp(-\beta\tilde{U})$ и

$$E_0 = -\frac{\langle N \rangle_0^2}{2V} U_I, \quad \tilde{U} = \frac{\langle N \rangle_0}{V} U_I, \quad (90)$$

где

$$U_I \equiv \int U(q) d\mathbf{q} = 4\pi \int_0^\infty U(q) q^2 dq. \quad (91)$$

В этом случае термодинамический потенциал

$$\tilde{\Omega} = -T \langle N \rangle_0 - U_I \frac{\langle N \rangle_0^2}{2V}, \quad (92)$$

где среднее число частиц $\langle N \rangle_0 = (V/\Lambda^3) \exp \beta(\mu - \tilde{U})$, а давление определяется формулой

$$p = -\frac{\tilde{\Omega}}{V} = \langle n \rangle_0 T + \frac{U_I \langle n \rangle_0^2}{2}. \quad (93)$$

Формула для энтропии принимает вид

$$\tilde{S} = \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{T} \right) \langle N \rangle_0 + U_I \frac{\langle N \rangle_0^2}{VT}. \quad (94)$$

Второе слагаемое в (94) дает поправку на межчастичное взаимодействие к формуле Сакура-Тетроде для идеального газа [45].

Формулы (93), (94) позволяют рассчитать теплоемкости при постоянном объеме $C_V = T \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T} \right)_{V, \langle N \rangle_0}$ и

постоянным давлением $C_p = T \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T} \right)_{p, \langle N \rangle_0}$:

$$C_V = \frac{3}{2} \langle N \rangle_0, \quad C_p = \frac{5}{2} \langle N \rangle_0 - \langle N \rangle_0 \frac{\beta U_I \langle n \rangle_0}{1 + \beta U_I \langle n \rangle_0}. \quad (95)$$

Как видим в приближении самосогласованного поля теплоемкость при постоянном объеме такая же, как в идеальном газе, а теплоемкость при постоянном давлении зависит от взаимодействия между частицами. Как известно из термодинамики [34] разность теплоемкостей

$$C_p - C_V = \frac{\langle N \rangle_0}{1 + \beta U_I \langle n \rangle_0} \quad (96)$$

должна быть положительной. Это выполняется при условии $1 + \beta U_I \langle n \rangle_0 > 0$. В частности, если в межчастичном взаимодействии преобладают силы отталкивания, так что $U_I > 0$, то данное условие выполнено при произвольных плотностях и температурах.

Аналогично могут быть рассчитаны адиабатическая $u_\sigma^2 = m^{-1} (\partial p / \partial n)_\sigma$ и изотермическая $u_T^2 = m^{-1} (\partial p / \partial n)_T$ скорости звука:

$$u_\sigma^2 = \frac{T}{m} \left(\frac{5}{3} + \beta U_I \langle n \rangle_0 \right), \quad u_T^2 = \frac{T}{m} (1 + \beta U_I \langle n \rangle_0), \quad (97)$$

где σ - энтропия единицы массы. Обратим внимание, что отношение теплоемкостей и квадратов скоростей звука одинаково:

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{u_\sigma^2}{u_T^2} = \frac{\frac{5}{3} + \beta U_I \langle n \rangle_0}{1 + \beta U_I \langle n \rangle_0}, \quad (98)$$

и, в отличие от случая идеального газа, зависит от температуры, возрастая с повышением температуры от единицы при $T \ll U_I \langle n \rangle_0$ до $5/3$ при $T \gg U_I \langle n \rangle_0$.

На малых расстояниях, как известно, между частицами имеет место сильное отталкивание. Поэтому для модельных потенциалов, например, таких как потенциал Леннарда-Джонса, которые быстро возрастают на малых расстояниях, интеграл (91) расходится. Это обстоятельство, в частности, являлось одним из аргументов в пользу того, что модель самосогласованного поля неприменима для описания классических многочастичных систем. Например, в книге [23], которая посвящена описанию кристаллических систем в рамках теории самосогласованного поля, утверждается, что данный подход неприменим к описанию жидкостей и переходов кристалл-жидкость. Очевидно, что теория, которая описывает состояние с нарушенной трансляционной симметрией, но непригодна для описания симметричного состояния, не может считаться последовательной. Однако в действительности, на наш взгляд, отсутствуют убедительные аргументы в пользу утверждения о неприменимости теории самосогласованного поля к пространственно-однородному состоянию.

Отметим, что использование потенциалов, быстро стремящихся к бесконечности на малых расстояниях, означает, что атом или другая сложная частица сохраняет свою индивидуальность при как угодно высоких давлениях. Между тем очевидно, что должно существовать некоторое критическое давление, при котором атомы сблизятся настолько, что будут «раздавлены» и потеряют свою индивидуальность. Поэтому требование абсолютной непроницаемости частиц при как угодно больших давлениях является излишне жестким и нефизическим и, вероятно, более правильно использовать потенциалы, стремящиеся к конечному значению при малых расстояниях. Отметим, что с необходимостью вычисления интеграла $\int U(r) dr$ приходится сталкиваться при выводе известного уравнения Гросса - Питаевского, широко используемого в настоящее время при описании атомарных бозе-эйнштейнских конденсатов [18,19]. В этом случае данный интеграл, расходящийся для потенциалов типа Леннарда-Джонса, заменяют конечной величиной – длиной рассеяния a_0 по формуле

$$a_0 = \left(m / \hbar^2 \right) \int_0^{\infty} U(r) r^2 dr, \text{ что по-существу означает использование потенциалов, не обращающихся в}$$

бесконечность на малых расстояниях. Следует, однако, обратить внимание, что приведенная формула для длины рассеяния справедлива только в борновском приближении, условие применимости которого, обычно, для реалистических потенциалов нарушается. Необходимо также отметить, что квантово-химические расчеты приводят к потенциалам с конечной величиной энергии в нуле [30,31].

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Приближение самосогласованного поля естественно использовать в качестве главного приближения для построения теории возмущений. В этом случае роль возмущения играет корреляционная энергия (55), которая представляет собой разность между точной энергией взаимодействия и энергией усредненной по самосогласованному состоянию. В отличие от теории возмущений, которая строится по величине взаимодействия, данная формулировка теории возмущений может быть применима и в том случае, когда взаимодействие не является слабым, а плотность числа частиц не является малой. Термодинамическая теория возмущений, основанная на приближении самосогласованного поля, в иной формулировке, аналогичной той, которая приведена в книге [34], была развита в [49].

Точная (58) и модельная вероятности (59), обнаружить систему в состоянии с числом частиц N и набором импульсов $p_N \equiv (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ и координат $q_N \equiv (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$, связаны соотношением

$$w_N(p_N, q_N) = \tilde{w}_N(p_N, q_N) \exp \beta (\Omega - \tilde{\Omega}) \exp [-\beta W(q_N)]. \quad (99)$$

Эта формула позволяет переходить от усреднения по точной вероятности, к усреднению с вероятностью в модели самосогласованного поля. Из условия нормировки следует связь между точным и приближенным термодинамическими потенциалами

$$\Omega = \tilde{\Omega} - T \ln \Theta, \quad (100)$$

где

$$\Theta \equiv \langle \exp [-\beta W(q)] \rangle_0. \quad (101)$$

Представим эту величину в виде $\Theta = \exp [-\beta \langle W(q) \rangle_0] (1 + \xi)$, где

$$\xi \equiv \frac{\langle \exp [-\beta W(q)] \rangle_0 - \exp [-\beta \langle W(q) \rangle_0]}{\exp [-\beta \langle W(q) \rangle_0]}. \quad (102)$$

Тогда термодинамический потенциал (100) примет вид

$$\Omega = \tilde{\Omega} + \langle W \rangle_0 - T \ln (1 + \xi), \quad (103)$$

В силу известного неравенства [23]

$$\langle \exp[-\beta W(q)] \rangle \geq \exp\langle [-\beta W(q)] \rangle, \quad (104)$$

закключаем, что $\xi \geq 0$ и, следовательно $\ln(1+\xi) \geq 0$. Таким образом, получаем известный вариационный принцип Боголюбова [50,51], дающий оценку для точного термодинамического потенциала

$$\Omega \leq \tilde{\Omega} + \langle W \rangle_0. \quad (105)$$

Это неравенство справедливо при произвольном разбиении конфигурационной энергии на два слагаемых $U(q) = \underline{U}(q) + W(q)$. Отметим, что для квантового случая доказательство этого неравенства приведено в [51], а в более компактной операторной форме – в [50]. Поскольку в модели самосогласованного поля корреляционная энергия определена так, что $\langle W \rangle_0 = 0$, то в этом случае из (105) имеем

$$\Omega \leq \tilde{\Omega}. \quad (106)$$

Таким образом, термодинамический потенциал в модели самосогласованного поля всегда больше точного термодинамического потенциала. Заметим, что обычное определение энтропии и теплоемкости по термодинамическому потенциалу, вычисленному с помощью вариационного принципа Боголюбова, в общем случае не всегда приводит к правильному результату [52]. Если же термодинамический потенциал рассчитан в модели самосогласованного поля, которое определено, как это было сделано выше, из условия $\delta\tilde{\Omega}/\delta\tilde{U}(\mathbf{q}) = 0$, то все термодинамические величины могут быть корректно вычислены по термодинамическому потенциалу системы.

Воспользовавшись представлением экспоненты в виде ряда, получаем

$$\Theta = 1 - \beta \langle W(q) \rangle_0 + \frac{\beta^2}{2!} \langle W^2(q) \rangle_0 - \frac{\beta^3}{3!} \langle W^3(q) \rangle_0 + \dots \quad (107)$$

Поскольку энергия E_0 находилась из требования $\langle W(q) \rangle_0 = 0$, то фактически разложение (107) начинается с квадратичного слагаемого, так что главной является квадратичная поправка по корреляционной энергии. В этом приближении термодинамический потенциал имеет вид

$$\Omega = \tilde{\Omega} - \frac{\beta}{2!} \langle W^2(q) \rangle_0. \quad (108)$$

В соответствии с (106), поправка второго порядка всегда отрицательна. Расчет среднего в (108) дает:

$$\langle W^2(q) \rangle_0 = \frac{\langle N \rangle_0^2}{2V} I. \quad (109)$$

С учетом найденной поправки (109) и формулы (92) получаем полный термодинамический потенциал с учетом поправки второго порядка

$$\Omega = -\frac{\langle N \rangle_0^2}{2V} I_2 - T \langle N \rangle_0 - \frac{\langle N \rangle_0^2}{4TV} I. \quad (110)$$

В (109) и (110) использованы обозначения:

$$I \equiv \frac{1}{V} \int U^2(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \tilde{F}(\mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{q}') d\mathbf{q} d\mathbf{q}', \quad I_2 \equiv \frac{1}{V} \int U(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \tilde{F}(\mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{q}') d\mathbf{q} d\mathbf{q}'. \quad (111)$$

Поскольку $p = -\Omega/V$, то в этом же приближении находим формулу для давления

$$p = \frac{T \langle N \rangle_0}{V} + \left(I_2 + \frac{I}{2T} \right) \frac{\langle N \rangle_0^2}{2V^2}. \quad (112)$$

Если ввести характерный радиус действия межчастичного потенциала r_0 и, соответственно, характерный объем $b \equiv 16\pi r_0^3/3$, то при выполнении условия $b \ll n \equiv \langle N \rangle_0/V$ уравнение (112) может быть записано в форме уравнения состояния Ван-дер-Ваальса $(p + an^2)(1 - bn) = nT$, где $a = bT - I_2/2 - I/4T$ [49].

ВЫВОДЫ

В работе метод корреляционных функций в представлении большого канонического ансамбля сформулирован с учетом действующего на отдельную молекулу среднего поля, создаваемого окружающими частицами, и построена теория возмущений на основе выбора в качестве главного приближения модели самосогласованного поля. Предложенную формулировку метода естественно использовать для описания систем с не малой плотностью и не слабым межчастичным взаимодействием, таких как плотные газы и жидкости. Метод самосогласованного поля для классических систем с короткодействующим взаимодействием между частицами в свое время развивался Власовым [10,12]. Однако отрицательное отношение к применению этого подхода для некулоновских систем некоторых ведущих физиков [11] существенно затормозило его дальнейшее развитие.

В плотных средах каждая частица постоянно взаимодействует с большим числом других частиц, поэтому такие понятия как длина свободного пробега и парные столкновения, используемые в кинетической теории газов, неприменимы к жидкостям. Напротив, представление о самосогласованном поле хорошо отражает реальную физическую ситуацию в плотных системах. Кроме того, приближенный учет взаимодействия между частицами в модели самосогласованного поля позволяет в принципе описывать фазовые переходы уже в этом приближении, которое может быть принято как главное приближение термодинамической теории возмущений [49]. Предлагаемый подход также может быть эффективен при описании систем большого числа частиц в пространственно-неоднородных условиях, например, вблизи поверхности или границы с твердым телом. Важным является и то, что в рамках метода самосогласованного поля помимо парных взаимодействий естественным образом учитываются тройные и более высокие взаимодействия, которые вносят существенный вклад в термодинамические свойства плотных систем [23,46], и учет которых оказывается необходимым для объяснения некоторых наблюдаемых эффектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bol'cman L. Izbrannye trudy. – M.: Nauka, 1984. – 590 s.
2. Libov R. Vvedenie v teoriju kineticheskikh uravnenij. – M.: Mir, 1974. – 371 s.
3. Bogoljubov N.N. Problemy dinamicheskoy teorii v statisticheskoy fizike. – M-L.: Gostehizdat, 1946. – 119 s.
4. Fisher I.Z. Statisticheskaja teorija zhidkostej. – M.: FML, 1961. – 280 s.
5. Smart Dzh. Jeffektivnoe pole v teorii magnetizma. – M.: Mir, 1968. – 271 s.
6. Hartri D. Raschjoty atomnyh struktur. M.: IIL, 1960. – 272 s.
7. Fok V. Priblizhennyj sposob reshenija kvantovoj zadachi mnogih tel // UFN. – 1967. – T. 93. – No.2. – S. 342-363.
8. Bogoljubov N.N. O principe kompensacii i metode samosoglasovanogo polja // UFN. – 1959. – T. 67. - No.4. – S. 549-580.
9. Vlasov A.A. O vibracionnyh svojstvah elektronno go gaza // ZhJeTF. – 1938. – T. 8. – No.3. – S. 291-318.
10. Vlasov A.A. Teorija mnogih chastic. - M-L.: GITTL, 1950. – 348 s.
11. Ginzburg V.L., Landau L.D., Leontovich M., Fok V. O nesostojatel'nosti rabot A.A. Vlasova po obobshhennoj teorii plazmy i teorii tverdogo tela // ZhJeTF. – 1946. – T. 16. – No.3. – S. 246-252.
12. Vlasov A.A. K obobshhennoj teorii plazmy i teorii tverdogo tela // Vestnik Moskovskogo universiteta. – 1946. – No.3-4. – S. 63-96.
13. Landau L.D. Teorija fermi-zhidkosti // ZhJeTF. – 1956. – T. 30. – No. 6. – S.1056-1064.
14. Akhiezer A.I., Krasil'nikov V.V., Peletminskij S.V., Yatsenko A.A. Research on superfluidity and superconductivity on the basis of the Fermi liquid concept // Phys.Reports. – 1994. – Vol. 245. – No.1&2. – P. 1-110.
15. Bardeen J., Cooper L., Schrieffer J. Theory of superconductivity // Phys. Rev. – 1957. – Vol. 108. - No.5. – P. 1175-1204.
16. Pitaevskij L.P. Vihrevye linii v neideal'nom Boze-gaze // ZhJeTF. – 1961. – T. 40. – P.646-651.
17. Gross E.P. Structure of a quantized vortex in boson system // Nuovo Cimento. – 1961. – Vol. 20. – P.454-457.
18. Pethick C.J., Smith H. Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, 2nd edn. – Cambridge University Press, Cambridge. – 2008. – P.569.
19. Pitaevskii L.P. and Stringari S. Bose-Einstein Condensation. – Oxford University Press, Oxford. – 2003. – P.385.
20. Braun Dzh. Edinaja teorija jadernyh modelej i sil. - M.: Atomizdat, 1970. – 288 s.
21. Metod Hartri-Foka v teorii jadra / B.I.Barc, Ju.L.Bolotin, E.V.Inopin, V.Ju. Gonchar – K.: Naukova dumka, 1982. – 208 s.
22. Solov'jov V.G. Teorija atomnogo jadra. Kvazichasticy i fonony. – M.: Energoatomizdat, 1989. – 304 s.
23. Bazarov I.P. Statisticheskaja teorija kristallicheskogo sostojanija. – M.: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 1972. – 118 s.
24. Bazarov I.P., Gevor'kjan Je.V., Kotenok V.V. Statisticheskaja teorija polimorfnyh prevrashhenij. – M.: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 1978. – 118 s.
25. Sljeter Dzh. Metody samosoglasovanogo polja dlja molekul i tvjordyh tel. – M.: Mir, 1978. – 662 s.
26. Vaks V.G., Larkin A.I., Pikin S.A. Metod samosoglasovanogo polja dlja opisaniya fazovyh perehodov // ZhJeTF. – 1966. – T. 51. – S. 361-375.
27. Polujektov Ju.M. O samosoglasovanom opredelenii kvazisrednih v statisticheskoy fizike // FNT. – 1997. – T. 23. – No.9. – S. 915-922.
28. Kirzhnic D.A. Polevye metody teorii mnogih chastic. – M.: Gosatomizdat, 1963. – 344 s.
29. Polujektov Ju.M. Kvantovopolevoe opisanie mnogochastichnyh fermi-sistem s narushennymi simmetrijami // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2001. – No.522. – Iss.2(14). - S.3-16.
30. Poluektov Ju.M. Pro kvantovopol'ovij opis bagatochastinkovyh fermi-sistem zi spontanno porushenimi simetrijami // UFZh – 2005. – T. 50. - No.11. – S. 1303-1315. [cond-mat. arXiv:1303.4913 (2013)].
31. Polujektov Ju.M. Kvantovopolevoe opisanie sistem vzaimodejstvujushhih boze-chastic // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2002. – No.569. – Iss.3(19). - S.3-14.
32. Poluektov Ju.M. Pro kvantovopol'ovij opis bagatochastinkovyh boze-sistem zi spontanno porushenimi simetrijami // UFZh. – 2007. – T. 52, - No.6. – S. 578-594. [cond-mat. arXiv:1306.2103 (2013)].
33. Rejms S. Teorija mnogielektronnyh sistem. – M.: Mir, 1976. – 333 s.
34. Landau L.D., Lifshic E.M. Statisticheskaja fizika. Chast' 1. – M.: Nauka, 1976. – 584 s.
35. Polujektov Ju.M. Model' samosoglasovanogo polja dlja prostranstvenno - neodnorodnyh boze-sistem // FNT. – 2002. – T. 28. – No.6. – S. 604-620.
36. Polujektov Ju.M. K teorii nelinejnogo kvantovannogo skaljarnogo polja s uchedom spontannogo narushenija simmetrii // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2009. - №859. – Iss.2(42). - S.9-20. [physics.gen-ph. arXiv:1507.00246 (2015)].

37. Poluektov Ju.M. Modificirovannaja teorija vozmushhenij dlja modeli Yukavy // *Izvestija vuzov. Fizika.* – 2010 – T.53. – No.2 – S. 54-61.
38. Verlet L. On the theory of classical fluids-III // *Physica.* – 1964. – Vol. 30. – P. 95-104.
39. Kovalenko N.P., Fisher I.Z. Metod integral'nyh uravnenij v statisticheskoj teorii zhidkostej // *UFN.* – 1972. – T. 108. – No. 2 – S. 209-239.
40. Krokston K. *Fizika zhidkogo sostojanija.* – M.: Mir, 1978. – 400 s.
41. Temperli G., Roulins Dzh., Rashbruk Dzh. *Fizika prostyh zhidkostej. Statisticheskaja teorija.* – M.: Mir, 1971. – 308 s.
42. Percus J.K., Yevick G.J. Analysis of classical statistical mechanics by means of collective coordinates // *Phys. Rev.* – 1958. – Vol.110. – No.1. – P. 1-13.
43. Wertheim M.S. Exact solutions of the Percus-Yevick equation for hard spheres // *Phys. Rev. Lett.* – 1963. – Vol.10. – No.8. – P. 321-323.
44. Percus J.K. Approximation method in classical statistical mechanics // *Phys. Rev. Lett.* – 1962. – Vol.8. – No.11. – P. 462-463.
45. Huang K. *Statisticheskaja mehanika.* – M.: Mir, 1966. – 520 s.
46. Poluektov Y.M., Soroka A.A., Shulga S.N. The self-consistent field model for Fermi systems with account of three-body interactions // *arXiv:1503.02428v1 [cond-mat. stat-mech (2015)]*.
47. Aziz R.A., Slaman M.J. An examination of ab initio result for the helium potential energy curve // *J. Chem. Phys.* – 1991. – Vol.94. – No.12. – P. 8047-8053.
48. Anderson J.B., Traynor C.A., Boghosian B.M. An exact quantum Monte Carlo calculation of the helium- helium intermolecular potential // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol.99. – No.1. – P. 345-351.
49. Poluektov Ju.M. Termodinamichna teorija zburen' dlja klasichnih sistem v nablizheni samouzgodzhenogo polja // *UFZh.* – 2015. – T. 60. – No.6. – S. 556-563.
50. Tjablikov S.V. *Metody kvantovoj teorii magnetizma.* – M.: Nauka, 1975. – 528 s.
51. Fejnman R. *Statisticheskaja mehanika.* – M.: Mir, 1975. – 407 s.
52. Wagner F., Koppe H. Zur berechnung von spezifischer wörme und entropie in der quantenstatistik // *Zeit. f. Naturforsch.* – 1965. – Vol.20A. – P. 1553-1556.

PACS: 47.60. Kz; 47.45.-n; 52.80.-s

CHOICE OF CONDITIONS FOR GAS OUTFLOW IN VACUUM AND CONFIGURATIONS OF A FORMING UNIT FEEDING A WORKING SUBSTANCE INTO THE PLASMA VOLUME

Yu.V. Kovtun, A.N. Ozerov, E.I. Skibenko, V.B. Yuferov

National Science Center "KhPTI"

Str. Akademichna 1, Kharkov, Ukraine, 61108

E-mail: ykovtun@kipt.kharkov.ua, ozerov@kipt.kharkov.ua

Received May 14, 2015

The paper presents formulated requirements to the gas-dynamic device designed for working substance feeding into the ionization zone of plasmas facilities. The role of geometrical factors in formation of a supersonic flow is determined, as well as, the role of gas-dynamic factors in attainment of necessary parameters beyond the forming element. The conditions for gas-dynamic flow clustering minimization in the course of outflow in vacuum.

KEY WORDS: plasma, nozzle, supersonicflow, vacuum, cluster

ВИБІР РЕЖИМУ ВИТІКАННЯ ГАЗУ У ВАКУУМ І КОНФІГУРАЦІЇ ФОРМУЮЧОГО ЕЛЕМЕНТУ ДЛЯ ПОДАЧІ РОБОЧОЇ РЕЧОВИНИ В ПЛАЗМОВИЙ ОБ'ЄМ

Ю.В. Ковтун, О.М. Озеров, Є.І. Скібенко, В.Б. Юферов

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

вул. Академічна 1, Харків, Україна, 61108

У роботі сформульовано вимоги до газодинамічного пристрою, призначеному для введення робочої речовини в зону іонізації плазмових пристроїв. Визначено роль геометричних факторів у формуванні надзвукового потоку, а також газодинамічних факторів у досягненні необхідних параметрів за межами формуючого елемента. Розглянуті умови мінімізації кластеризації газодинамічних потоків при витіканні в вакуум.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: плазма, сопло, надзвуковий потік, вакуум, кластер

ВЫБОР РЕЖИМА ИСТЕЧЕНИЯ ГАЗА В ВАКУУМ И КОНФИГУРАЦИИ ФОРМИРУЮЩЕГО ЭЛЕМЕНТА ДЛЯ ПОДАЧИ РАБОЧЕГО ВЕЩЕСТВА В ПЛАЗМЕННЫЙ ОБЪЕМ

Ю.В. Ковтун, А.Н. Озеров, Е.И. Скибенко, В.Б. Юферов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая 1, Харьков, Украина, 61108

В работе сформулированы требования к газодинамическому устройству, предназначенному для ввода рабочего вещества в зону ионизации плазменных установок. Определена роль геометрических факторов в формировании сверхзвукового потока, а также газодинамических факторов в достижении необходимых параметров за пределами формирующего элемента. Рассмотрены условия минимизации кластеризации газодинамических потоков при истечении в вакуум.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: плазма, сопло, сверхзвуковой поток, вакуум, кластер

Известно [1-13], что сверхзвуковые газодинамические потоки и струи находят достаточно широкое применение в различных разделах научного физического эксперимента и его различных практических применениях. Например, в физике атомных и электронных столкновений в качестве мишеней для перезарядки ионных пучков [1,2,4], в ядерной физике как поляризаационные мишени [5], в молекулярной физике как источники молекулярных пучков [6, 7], в спектроскопии как источники вакуумного ультрафиолета [8, 9], в нанотехнологиях как один из возможных источников получения кластеров больших размеров и интенсивностей [10-12], а также для подачи рабочего вещества и сопутствующих материалов в плазменные и термоядерные установки [13]. Помимо этого, сверхзвуковые потоки и струи могут найти достаточно широкое применение при проведении физических исследований и технологических разработок в области магнито-плазменной переработки отработанного ядерного топлива в частности, методов эффективного ввода перерабатываемых материалов в плазменный объем разделительного устройства [14].

Одним из преимуществ в использовании сверхзвуковых газодинамических потоков в плазменных устройствах является возможность формирования локализованной в пространстве с заданными параметрами области взаимодействия нейтрального газа (пара) с плазмой. Это дает возможность уменьшить, вдали от области взаимодействия, вклад процесса перезарядки в энергобаланс плазмы, т.е. снизить энергетические потери из плазмы.

Выполненные ранее работы [13, 15-18] по инъекции газа в плазменный объем, не решали одного важного вопроса – распределение плотности потока в дальнем поле струи, что весьма важно при выборе конфигурации формирователя потока и его пространственной локализации, т.е. места его расположения относительно плазменного образования. В работе [19] экспериментально установлен критерий подобия для формирующего элемента по углу расходимости сверхзвуковой струи, при ее истечении в вакуум от геометрии формирующего

элемента (сверхзвукового сопла), который задается отношением l/d_v , где l – длина сверхзвуковой (диффузорной) части сопла, d_v – диаметр выходного отверстия сопла.

Существенно важным вопросом при выборе режима истечения газа в вакуум и конфигурации формирующего элемента для подачи рабочего вещества в плазменный объем является возможность и степень кластеризации газодинамического потока [10-12]. Важность этого вопроса определяется тем, что цепочка процессов, происходящих при образовании кластеров и кластерных конгломератов (пучков) является достаточно сложной и неравновесной.

В тоже время газодинамическое устройство, созданное на этих принципах подобия, должно удовлетворять следующим эксплуатационным требованиям:

- обеспечивать стационарный и импульсный режим работы;
- обеспечивать инжекцию нейтрального газа как вдоль, так и поперек магнитного поля на требуемые расстояния от среза формирующего элемента;
- поперечный размер газодинамического потока должен быть сравним, но не более, поперечного размера токового канала или плазменного образования, определяемого размерами поперечника, например, катодной поверхности применительно к отражательному разряду или электронного пучка в случае пучково-плазменного разряда;
- перепад плотности газа на границе струя - вакуум должен составлять несколько порядков величин;
- массовый расход рабочего вещества должен обеспечивать создание плазмы плотностью $\sim 10^{14}$ см⁻³ в большом объеме с достаточно тонкой регулировкой его величины;
- сверхзвуковой поток рабочего вещества, инжектируемый в плазменный объем, должен быть однородным по составу и в нем должно быть полное отсутствие тяжелых кластеров, а их количество должно быть минимизировано.

Таким образом, постановка задачи на первом этапе заключается в обосновании возможности выбора режима ввода рабочего вещества в плазменный объем в виде сверхзвукового (газодинамического) потока заданной интенсивности (плотности) и расходимости на заданное расстояние, а в дальнейшем (на втором этапе) практическая реализация устройства заданной конфигурации и требуемых параметров.

Цель данной работы заключается в обосновании возможности выбора режима ввода рабочего вещества в плазменный объем в виде сверхзвукового (газодинамического) потока заданной интенсивности (плотности) и расходимости на заданное расстояние, а также условий достижения минимально возможного уровня его кластеризации.

РОЛЬ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ В ФОРМИРОВАНИИ СВЕРХЗВУКОВОГО ПОТОКА

Плотная газовая мишень, необходимая для образования высокоплотной плазмы, создается путем истечения газа в вакуум через сопло Лавала или сопло другой конфигурации. В результате чего образуется сверхзвуковая недорасширенная газовая струя, истекающая в затопленное пространство и характеризующаяся степенью нерасчетности $n=P_a/P_\infty$, где P_a – давление на срезе сопла, P_∞ - давление в окружающей газовой среде.

Для анализа поведения газового потока в проводящем канале, а именно в сопле, воспользуемся уравнением обращения воздействия [20]:

$$\frac{dS}{S} = \frac{dv}{v} \cdot (M^2 - 1), \quad (1)$$

где S - площадь поперечного сечения проводящего канала, v – скорость газа в канале, $M = v/a$ – число Маха, a – местная скорость звука. Это уравнение описывает закономерность изменения скорости потока от площади поперечного сечения, при этом принимается ряд допущений, в которых газ считается идеальным, а поток одномерным, стационарным и адиабатическим. Из уравнения (1) видно, что для увеличения скорости потока v ($dv > 0$) при дозвуковой скорости, когда $v < a$ ($M < 1$), поперечное сечение S должно уменьшаться ($dS < 0$), а при сверхзвуковой скорости при $v > a$ ($M > 1$) поперечное сечение S должно увеличиваться ($dS > 0$). Движение газа со скоростью звука ($M = 1$), соответствует самому узкому месту, когда площадь поперечного сечения достигает экстремума ($dS = 0$) и называется критическим сечением. Таким образом, при совмещении сходящегося и расходящегося конусов можно получить устройство, при движении по которому, газовый поток будет ускоряться до сверхзвуковых скоростей. Этот принцип и был использован в 1890 году шведским инженером Лавалем для конструкции сопла паровой турбины.

В зависимости от величины противодавления P_∞ (давление окружающей газовой среды) поток через сопло может вести себя по-разному. При $P_\infty = P_0$ течения нет и расход газа $G=0$. При уменьшении P_∞ устанавливается дозвуковое течение в сопле. При некотором значении противодавления P_∞ в минимальном сечении сопла устанавливается скорость звука, а давление становится равным критическому $P_{кр}$. При этом возможны два режима течения в расширяющейся части: дозвуковое течение, если $P_\infty = P_v > P_{кр}$, и сверхзвуковое $P_\infty = P_v < P_{кр}$. При дальнейшем понижении противодавления P_∞ течение в сопле не изменяется [20].

Изменение числа Маха вдоль трубки тока может быть определено по формуле [20, 21]

$$\frac{S_v}{S_k} = \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \cdot \frac{1}{M} \cdot \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \cdot M^2 \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}, \quad (2)$$

где S_v и S_k – площадь выходного и критического сечения сопла, γ – показатель адиабаты – отношение удельных теплоемкостей расширяющегося газа, для одноатомных газов 5/3, двухатомных 7/5, трехатомных 4/3.

Изменение других параметров можно определить с помощью газодинамических функций [20-22]

$$\frac{T_0}{T_v} = 1 + \frac{\gamma-1}{2} \cdot M^2, \quad (3)$$

$$\frac{P_0}{P_v} = \left(\frac{\rho_0}{\rho_v} \right)^\gamma = \left(\frac{T_0}{T_v} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} = \left(\frac{a_0}{a_v} \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}}, \quad (4)$$

где T_0 , P_0 , ρ_0 , a_0 и T_v , P_v , ρ_v , a_v – температура, давление, плотность, скорость звука в газе, соответственно, на входе и выходе сопла. В предположении, что течение газа является изоэнтропическим, по выше приведенным соотношениям были определены безразмерные зависимости $S_v/S_k=f(M)$ – рис. 1, $T_0/T_v=f(M)$ – рис. 2, $P_0/P_v=f(M)$ – рис. 3, ρ_0/ρ_v – рис. 4 и $a_0/a_v=f(M)$ – рис. 5. Как видно из рис. 1 при $S_v/S_k=const$ наибольшее значение числа Маха и соответственно наибольшее изменение температуры (рис. 2) и скорости звука (рис. 5) достигается для одноатомных газов ($\gamma=5/3$). Для трехатомных газов ($\gamma=4/3$) наблюдается наибольшее изменение давления (рис. 3) и плотности (рис. 4).

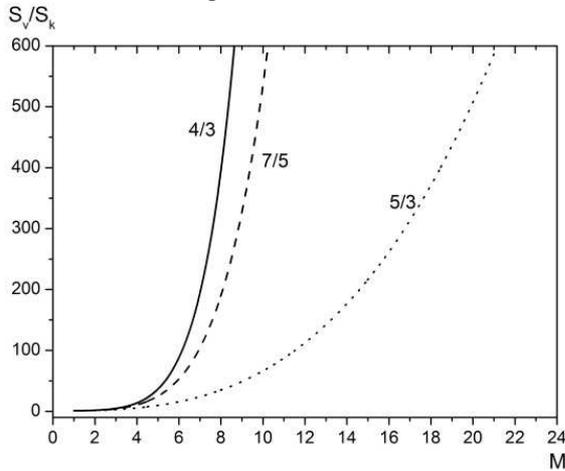


Рис. 1. Зависимость отношения площадей выходного сечения сопла к критическому сечению от числа Маха для различных значений γ

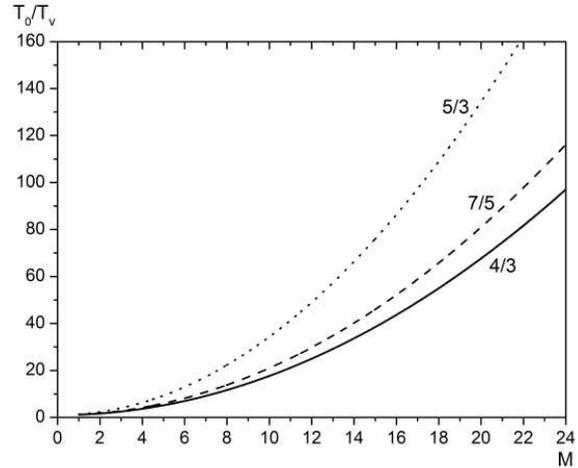


Рис. 2. Зависимость отношения температур газа во входном и выходном сечении сопла от числа Маха при различном γ

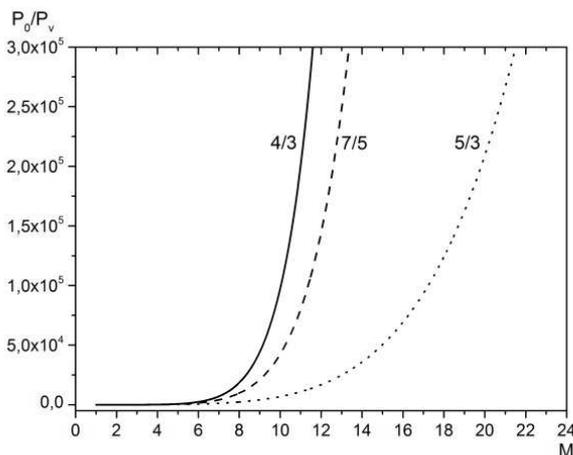


Рис. 3. Зависимость отношения давлений газа во входном и выходном сечении сопла от числа Маха при различном значении γ

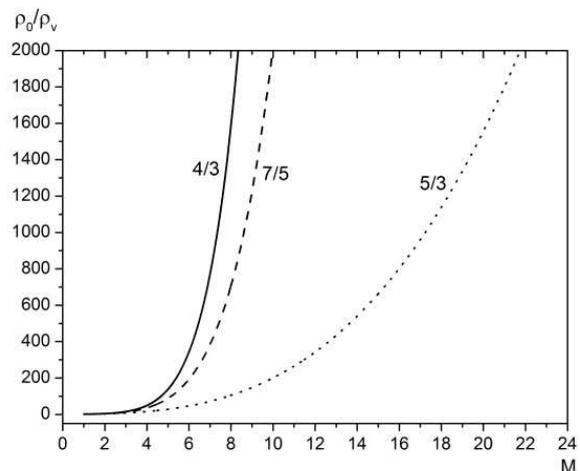


Рис. 4. Зависимость отношения плотности газа на входе в сопло к плотности на выходе от числа Маха для различных значений γ

В качестве газодинамического устройства для создания газовой мишени (инъекции газа в плазменный объем) было выбрано сопло с геометрией близкой к оптимальной, из серии сопел описанных ранее в [19].

Сопло (рис. 6) имеет следующие геометрические размеры: диаметр и длина конфузурной (сходящейся) части сопла 4 и 12,5 мм, диаметр и длина диффузорной (расходящейся) части сопла 8 и 32,5 мм. Геометрия конфузурной части сопла задается углом сходящегося конуса равным $2\alpha_2=16,66^\circ$, геометрия диффузорной части сопла определяется углом расходящегося конуса $2\alpha_1=13,44^\circ$. Диаметр критического сечения 0,33 мм и соответственно $S_v/S_k=587,69$. Проведем расчет и анализ газодинамических параметров рассматриваемого сопла и образованного им газодинамического потока (струи). По данным полученным из графиков (рис. 1-5), для данного сопла с $S_v/S_k=587,69$, были определены основные газодинамические отношения потока заторможенного и движущегося газа, которые представлены в таблице 1.

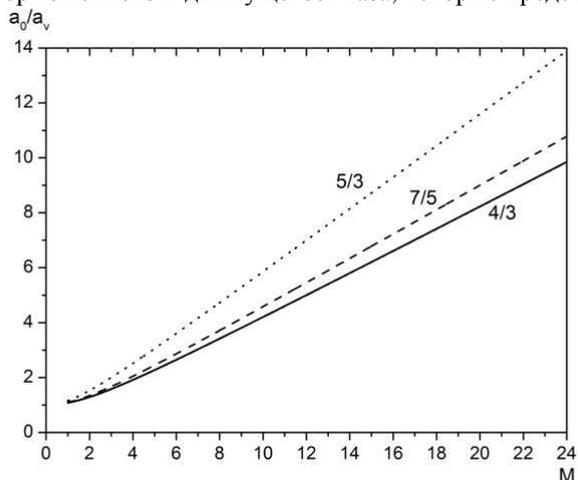


Рис. 5. Зависимость отношения местной скорости звука газа во входном и выходном сечении сопла от числа Маха при различном γ

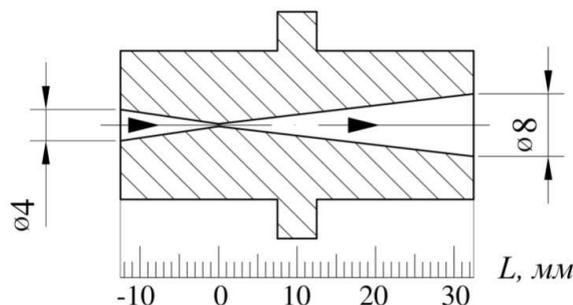


Рис. 6. Геометрия исследуемого сопла

Таблица 1

Основные газодинамические отношения потока газа проходящего через сопло

Параметры потока	γ		
	5/3	7/5	4/3
M	21	10,2	7,9
T_0/T_v	148,2	21,8	10,4
P_0/P_v	267218,2	48347,7	25669,3
ρ_0/ρ_v	1803,5	2218,1	2465,2
a_0/a_v	12,2	4,7	3,2

Принимая температуру газа Ag над (перед) соплом (температуру торможения) $T_0=293$ К и концентрацию частиц в выходном сечении сопла $N_v=1 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ определим параметры заторможенного и движущегося газа, используя выражения (3-5) и основное уравнение кинетической теории газов (Клайперона-Менделеева). Результаты расчета приведены в таблице 2, где содержатся вышеперечисленные параметры газа до и после сопла, а также $v_v(\text{м/с})$ скорость выходного потока и G – массовый расход газа. При предельном откачиваемом давлении в камере плазменной установки $P_\infty \leq 0,001333$ Па, в объеме будет формироваться недоросширенная газовая струя со степенью нерасчетности $n \geq 200$. При этом распределение давления и других газодинамических параметров газа вдоль оси сопла остается расчетным, поскольку уменьшение противодавления P_∞ не может распространиться вверх по течению сверхзвукового потока [23].

Таблица 2

Основные параметры газа Ag на входе и выходе сопла

$T_0, \text{К}$	$P_0, \text{Па}$	$\rho_0, \text{кг/м}^3$	$a_0, \text{м/с}$	$G=v_v \cdot \rho_v \cdot S_v, \text{кг/с}$
293	$7,296 \cdot 10^4$	1,196	318,79	$1,835 \cdot 10^{-5}$
$T_v, \text{К}$	$P_v, \text{Па}$	$\rho_v, \text{кг/м}^3$	$a_v, \text{м/с}$	$v_v=M \cdot a_v, \text{м/с}$
1,98	0,273	$6,63 \cdot 10^{-4}$	26,19	550,31

Изменение параметров газового потока по оси сопла можно получить, задаваясь дискретными значениями числа Маха. Согласно формулам (2-5) находим соответствующие площади поперечного сечения сопла и значения основных газодинамических параметров потока в этих сечениях. На рис. 7 и 8 представлены распределения основных газодинамических параметров формируемого потока вдоль оси сопла.

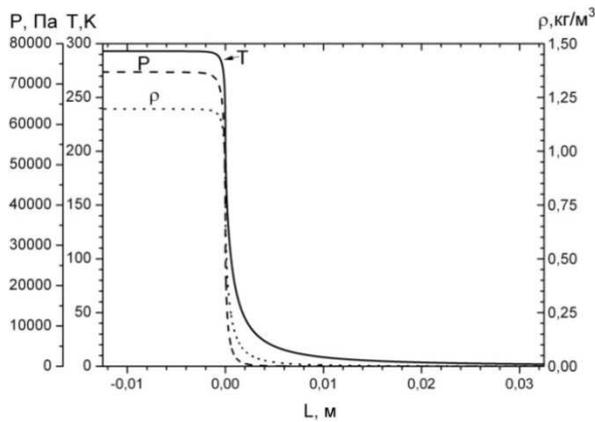


Рис. 7. Распределение давления P , температуры T и плотности ρ газа вдоль оси сопла

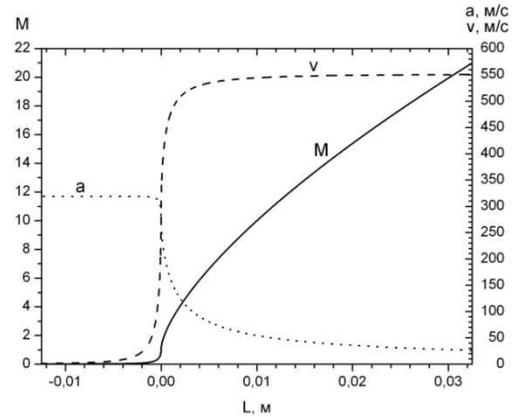


Рис. 8. Распределение числа Маха M , местной скорости звука a , и скорости потока газа v вдоль оси сопла

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ СВЕРХЗВУКОВОГО ПОТОКА, ИСТЕКАЮЩЕГО В ВАКУУМ, И УСЛОВИЯ ЕЕ МИНИМИЗАЦИИ

Одним из наиболее быстро развивающихся разделов экспериментально-теоретических исследований в области физики и химии являются исследования с кластерными пучками [10-12, 24, 25]. В данном случае в рамках поставленной задачи требование минимизации уровня кластеризации потока связано с необходимостью реализации другого требования, предъявляемого к формированию сверхзвукового (газодинамического) потока рабочего вещества, получение однородного по составу потока рабочего вещества, инжектируемого в зону образования плазмы.

Известны [12, 26, 27] различные методы получения кластеров и кластерных пучков. Это агрегация газа, эрозия поверхности твердого тела, распыление, лазерная абляция, импульсные дуговые разряды, агрегация кластеров. Особое место в этом перечне занимает метод получения кластеров и кластерных пучков в сопловых источниках. Начало этому было положено в 1956 году Бекером и Хенкесом [28], которые обнаружили интенсивную конденсацию вещества в сверхзвуковых струях, формирующихся при газодинамическом расширении газа через небольшие сопла. Процесс кластеризации потока можно представить следующим образом. Газ, первоначально находящийся перед соплом в покое при температуре T_0 и давлении P_0 , при истечении через сопло в вакуум расширяется. При этом газ ускоряется и охлаждается адиабатически. Когда газ за счет охлаждения становится пересыщенным, начинается рост кластеров. В результате в сверхзвуковой струе образуется смесь кластеров и газа (неконденсированных частиц). Процесс формирования кластеров и их размеров зависят от условий расширения газа в струе [10, 11]. Для характеристики процесса формирования кластеров был введен безразмерный параметр [29]:

$$\Gamma^* = k_g \cdot \frac{(d)^{0,85} \cdot P_0}{T_0^{2,29}}, \quad (5)$$

где d – диаметр критического сечения сопла, мкм; P_0 – давление над соплом, мбар; T_0 – температура газа до расширения; k_g – константа, зависящая от сорта газа, например, для Kr $k_g=2,9 \cdot 10^3$, Ar $k_g=1,7 \cdot 10^3$, Ne $k_g=1,8 \cdot 10^2$, He $k_g=4$.

Процессы формирования или не формирования кластеров в сопловых устройствах довольно сильно зависят от формы сопла. Использование звуковых сопел с точки зрения минимизации уровня кластеризации газодинамического потока (струи) вполне приемлемо, но это противоречит требованию по расходимости потока и требуемой плотности потока в дальнем поле струи, т. е. на требуемом расстоянии в зоне образования плотностей плазмы $10^{14} \div 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Для сопел конической формы величина d в выражении (5) должна быть заменена на диаметр «эквивалентного конического сопла» d_{eq} , которое дается следующим отношением:

$$d_{eq} = \frac{c(\gamma) \cdot d}{\text{tg } \alpha_1}, \quad (6)$$

где $c(\gamma)$ – константа, зависящая от типа газа, для одноатомного газа $c(\gamma)=0,73$, двухатомного газа $c(\gamma)=0,86$, многоатомного газа $c(\gamma)=0,98$; α_1 – угол, равный половине угла конуса расходящейся части сопла. Поэтому для рассматриваемого сопла (см. рис. 6) выражение (5) с учетом отношения (6) примет следующий вид

$$\Gamma^* = k_g \cdot \left(\frac{c(y) \cdot d}{\text{tg } \alpha_1} \right)^{0,85} \cdot \frac{P_0}{T_0^{2,29}} \quad (7)$$

На рис. 9 представлены расчетные зависимости безразмерного параметра Γ^* от диаметра критического сечения сопла и половинного угла конуса расходящейся части сопла при значениях $P_0=1$ бар и $T_0=293$ °К для Ar. Видно, что зависимость $\Gamma^*=f(d)$ с фиксированным углом конуса расходящейся части сопла $2\alpha_1=13,44^\circ$, уже при $d>50$ мкм позволяет достигать значений $\Gamma^*>10^3$. Функция $\Gamma^*=f(\alpha)$ при диаметре критического сечения сопла $d=330$ мкм принимает значения $\Gamma^*>10^3$ только лишь с углом $2\alpha_1<23^\circ$. Итог большого количества исследований заключается в том, что интенсивная кластеризация сверхзвукового потока начинается тогда, когда параметр Γ^* превышает величину 300. Средний размер кластеров при этом увеличивается (грубо) пропорционально величине $(\Gamma^*)^{2,0+2,5}$ [10, 30]. Большие кластеры с числом частиц $N>10^4$ атомов/кластер формируются в условиях, когда $\Gamma^*>5 \cdot 10^4$. Представляет интерес провести оценки параметра Γ^* для рассматриваемого сопла. На рис. 10 приведены расчетные зависимости безразмерного параметра Γ^* от давления P_0 на входе в сопло при диаметре критического сечения сопла 0,33 мм и $T_0=293$ °К для Ar и He. Из представленных зависимостей видно, что кластеризация сверхзвукового потока для Ar начинается при меньших давлениях над соплом в сравнении с He и будет происходить при давлении большем, чем $7,1 \cdot 10^3$ Па. При давлении $P_0>2,37 \cdot 10^4$ Па начинается массовое кластерообразование ($\Gamma^*>10^3$) с размерами кластеров более 100 атомов на кластер. Таким образом, выбранный режим и параметры течения газа Ar через сопло (табл. 2) будут способствовать образованию кластеров в потоке рабочего вещества, инжектируемого в зону образования плазмы. В случае течения газа He выполняются условия минимизации кластеризации газодинамического потока (струи) при истечении в вакуум. Таким образом, данные рис. 10 позволяют находить зону минимальной кластеризации потока, что хорошо видно на примере He.

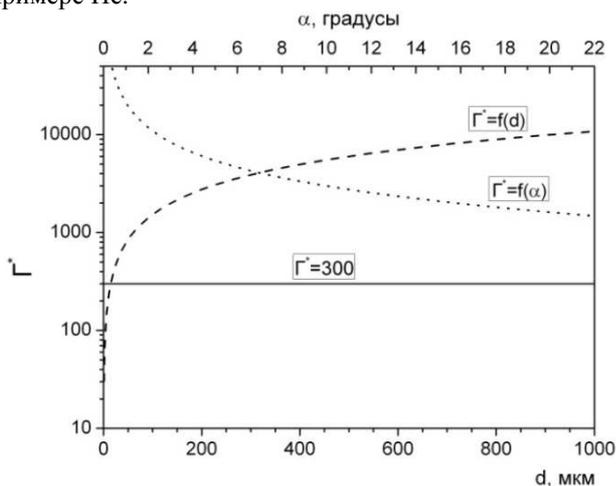


Рис. 9. Зависимости параметра Γ^* от диаметра критического сечения сопла и половинного угла конуса расходящейся части сопла. Сплошной горизонтальной линией отмечена граница нарастания процессов кластеризации в сверхзвуковом потоке при $\Gamma^*>300$

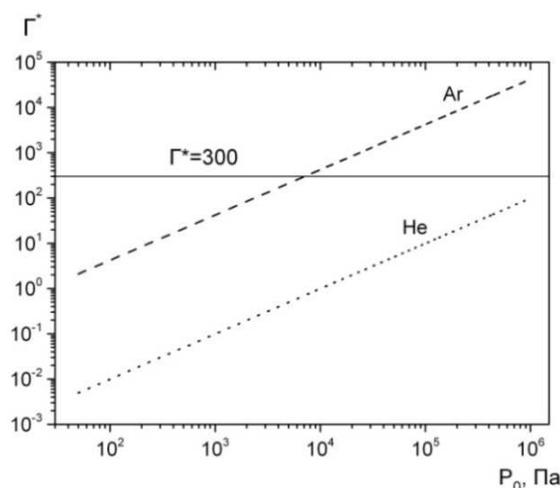


Рис. 10. Зависимости параметра Γ^* от давления на входе в сопло. Сплошной горизонтальной линией отмечена граница нарастания процессов кластеризации в сверхзвуковом потоке при $\Gamma^*>300$

РОЛЬ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ В ДОСТИЖЕНИИ НЕОБХОДИМЫХ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХЗВУКОВОГО ПОТОКА ЗА ПРЕДЕЛАМИ ФОРМИРУЮЩЕГО ЭЛЕМЕНТА

Большое значение для выбора геометрии формирующего элемента и конструкции газодинамического устройства для создания газовой мишени, необходимой для образования высокоплотной плазмы, имеет информация о распределении плотности потока в дальнем поле струи. Существует несколько возможностей [31-34] получения данных об этом. Это экспериментальные исследования плотности потока в дальнем поле струи, использование численных методов, что является достаточно трудоемким и, наконец, нередко используются приближенные модели, которые с различной степенью точности могут соответствовать численному и физическому эксперименту и не учитывать вязкости газодинамического потока. Реально из-за наличия пограничного слоя вблизи стенок формирующего поток элемента плотность газа в периферийной части струи существенно больше плотности, вычисленной для случая невязкого (идеального) истечения газа в вакуум. В [31-34] были предложены несколько приближенных (уточненных) моделей, позволяющих повысить точность расчета параметров сверхзвуковой струи, истекающей в вакуум из реальных сопел. Областью применимости этих моделей является дальнее поле струи, которое начинается с границы сплошности вниз по потоку, где скорость газа в струе возрастает, приближаясь к предельному значению $V_{\max}=(2\gamma RT_0/(\gamma-1))^{1/2}$, а линии тока практически прямолинейны; критерием этого является согласно [35] отношение $r/r_c \geq 10$, где r –

радиус струи, r_e – радиус сопла на срезе. Ниже приведем некоторые аппроксимации численных расчетов распределения плотности газа в дальнем поле осесимметричной сверхзвуковой струи в декартовой системе координат с началом координат в центре выходного сечения сопла и в полярной системе координат с началом в центре выходного сечения сопла, в виде формул:

I. Модель Майрелса [33]:

$$\frac{\rho(x, y)}{\rho_v} = \frac{y^2 - 1}{4} M^2 \left(\frac{x}{r_e} \right)^{-2} \left(1 - \left(\frac{(y-1)y \cdot M}{2x} \right)^2 \right)^{\frac{2}{(\gamma-1)}}, \quad (8)$$

где x, y – продольная и поперечная координаты расчетной точки. Данные, полученные по формуле (8), соответствуют результатам, полученным методом характеристик, при очень больших числах Маха на выходе сопла (в работе [36] сравнение приведено при $M \geq 10, \gamma = 1,4$).

II. Модель Лейтса [32]

$$\frac{\rho}{\rho_v} = \frac{V_v}{V_{\max}} \cdot \frac{0,4}{(1-J)} \cdot \frac{r_e^2}{x^2} \cdot \frac{1}{1 + 0,5 \cdot \omega^3}, \quad (9)$$

где $\omega = \frac{y}{x} \cdot \frac{1}{(1-J)^{0,5}}$ – угловой параметр, $J = \left(1 + \frac{1}{\gamma \cdot M^2} \right) \left(1 + \frac{2}{\gamma-1} \cdot \frac{1}{M^2} \right)^{\frac{1}{2}}$ – относительный импульс газа на срезе сопла.

III. Модель Шувалова [31]

$$\frac{\rho(r, \theta)}{\rho_0} = \frac{\gamma+1}{2} \left(1 + \frac{k_1}{2 \cdot \gamma} \right)^{\frac{-1}{(\gamma-1)}} \left(1 + \frac{k_1}{2 \cdot \gamma} - \gamma^{-1} \right) \left(\frac{r}{r_e} \right)^{-2} \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^{\beta_1}, \quad (10)$$

где $k_1 = \gamma(\gamma-1)M^2$ – имеет смысл параметра подобия для рассматриваемого класса струй; θ – угол расширения струи, $\beta_1 = 1,249 \cdot e^{0,418 \cdot M}$.

IV. Модель Робертса [32, 33]

$$\frac{\rho(r, \theta)}{\rho_0} = 0,5 k_1 \left(1 + \frac{k_1}{2 \cdot \gamma} \right)^{\frac{-1}{(\gamma-1)}} \left(\frac{r}{r_e} \right)^{-2} (\cos \theta)^{k_1}, \quad (11)$$

V. Модель Герасимова [32]

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{0,21 \cdot (\gamma-1)^{0,5} \cdot r_k^2}{r^2 \cdot \theta_+^2} \cdot e^{-0,5 \left(\frac{\theta}{\theta_+} \right)^2}, \quad (12)$$

где $\theta_+ = \arctg \left(\sqrt{\frac{(1-J)}{J}} \right)$ – нормировочный угол, определяемый через относительный импульс газа на срезе сопла J .

Проведем оценки при истечении Ag для рассматриваемого сопла при $\rho_0 = 1,196 \text{ кг/м}^3$ и $\rho_v = 6,63 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3$. Результаты проведенных оценок по формулам (8-12) для осевого распределения плотности пересчитаны для концентрации частиц N по формуле $N = \rho R / k_b$, где k_b – постоянная Больцмана, и приведены на рис. 11. Расчеты проводились, начиная с дальнего поля струи $r \approx 10 r_e \approx 0,04 \text{ м}$ и заканчивая габаритными размерами камеры плазменной установки $0,14 \text{ м}$. Видно, что модели I, II, III дают совпадающие данные, которые практически укладываются на одну кривую. Значения оценок для моделей IV и V дают превышение на 25÷35% от значений рассчитанных по моделям I, II, III.

Проверка достоверности аппроксимационных расчетов (оценок) проводилась путем их сравнения с экспериментальными данными, полученными в [18] (см. рис. 12). Расчет проводился по аппроксимационным моделям I-III для Ag и CO_2 , с расходом газа соответственно $7,8 \text{ см}^3/\text{с}$ и $15,7 \text{ см}^3/\text{с}$, таким же как и в

экспериментальной работе. Максимальное отклонение экспериментальных точек от расчетных кривых для Ar 45%, для CO₂ при расходах газа $q=15,7 \text{ см}^3/\text{с}$ 118%, а при $q=7,8 \text{ см}^3/\text{с}$ 120%.

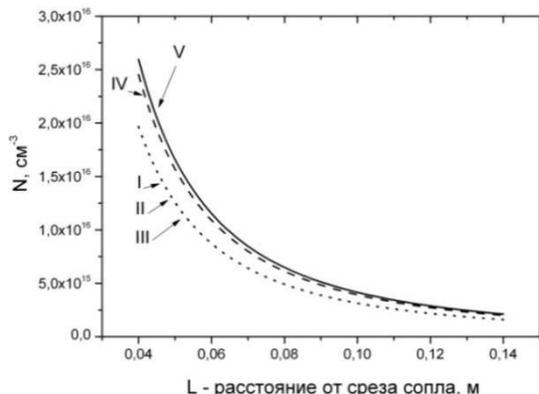


Рис. 11. Осевое распределение плотности частиц в зависимости от расстояния за срезом сопла. Расчетные модели: I - Майрелс, II – Лейтс, III – Шувалова, IV – Робертс, V - Герасимов

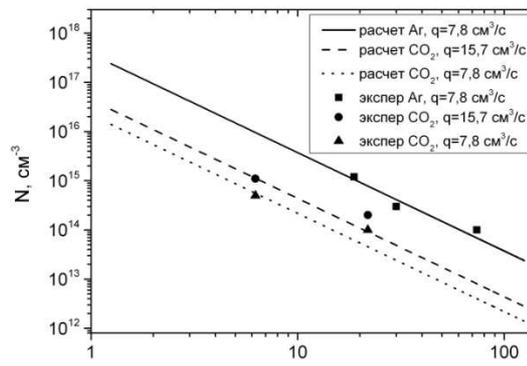


Рис. 12. Зависимость осевой плотности частиц сверхзвукового потока на удалении L от среза сопла, выраженного в калибрах диаметра d_v выходного отверстия сопла при фиксированных значениях расхода газа q через сопло

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены главные аспекты по созданию газодинамического устройства для ввода рабочего вещества в газо-парообразном состоянии в плазменные установки, в том числе и устройства магнитоплазменного разделения отработанного ядерного топлива. Задача создания такого устройства имеет заметную предысторию [1, 2, 13, 15-19], так как подобные устройства ранее использовались для образования электронногорячей плазмы высокой плотности ($\geq 10^{15} \text{ см}^{-3}$) в открытых ловушках и на уровне $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ в замкнутых ловушках.

В рамках поставленной задачи были рассмотрены следующие вопросы:

- сформулированы требования к создаваемому газодинамическому устройству для подачи рабочего вещества в плазменный объем в виде сверхзвукового потока заданной интенсивности и расходимости на требуемое расстояние;

- расчетным путем в предположении изэнтропического течения газа определены характерные параметры ($S_v/S_k=f(M)$, $T/T_0=f(M)$, $P/P_0=f(M)$, $\rho/\rho_0=f(M)$, $a/a_0=f(M)$) газодинамического потока, формируемого с помощью сходящегося-расходящегося сопла, на входе и выходе и вдоль его продольной оси ($P, T, \rho, =f(l)$ и $M, a, v=f(l)$);

- проведен анализ возможной кластеризации сверхзвукового потока и на основании этого рассмотрены условия минимизации уровня кластеризации газодинамических потоков (струй) при их истечении в вакуум;

- с помощью приближенных моделей аппроксимации результатов численных и физических экспериментов определено изменение плотности сверхзвукового потока, истекающего в вакуум, в дальнем поле струи, которое начинается с (от) границы сплошности вниз по потоку, где скорость газа возрастает до предельных величин, а линии тока практически прямолинейны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fogel' Ja.M., Lisochkin G.I., Stepanova G.I. Sverhzvukovoe istechenie rtutnogo para v vakuum // ZhTF. – 1955. – Т. 25. – No. 11. – S. 1944-1953.
2. Borovik E.S., Busol F.I., Juferov V.B., Skibenko E.I. Issledovanie sverhzvukovoj strui uglekislogo gaza v kachestve misheni dlja perezarjadki ionov // ZhTF. – 1963. – Т. 33. – No. 8. – S. 973-981.
3. Varencov L.V. Gazodinamicheskoe ohlazhdenie molekuljarnyh i ionnyh puchkov nizkih energij // ZhTF. – 1994. – Т. 64. – No. 4. – S. 17-28.
4. Bejgman I.L., Levashov V.E., Mednikov K.N., Pirozhkov A.S., Ragozin E.N., Tolstihina I.Ju. Perezarjadka mnogozarjadnyh ionov lazernoj plazmy na atomah strui blagorodnogo gaza // Kvantovaja elektronika. – 2007. – Т. 37. – No. 11. – S. 1060-1064.
5. Varencov L.V., Okunev I.S. Metod poluchenija vnutrennih poljarizovannyh mishenej iz srednih i tzhzhelyh jader dlja uskoritelej-nakopitelej // Pis'ma v ZhTF. – 1996. – Т. 22. – No. 6. S. 48-51.
6. Campargue R. Atomic and Molecular Beams: the State of the Art 2000. Springer, Berlin, 2001. – 999 p.
7. Korobejshnikov N.G., Zarvin A.E. Impul'snye sverhzvukovye strui: primeneniye, problemy, reshenija // Vestnik NGU. Serija: Fizika. – 2006. –Т 1. - No. 2. – S. 29-47.
8. Verhovceva Je.T., Jaremenko V.I., Ovechkin A.E., Fogel' Ja.M. O nepreryvnom spektre v vakuumnoj ul'traioletovoj oblasti, izluhaemom sverhzvukovoj struej argona, vzbuzhdennoj elektronnyim puchkom // Optika i spektroskopija. – 1974. – Т. 37. - No. 2. – S. 221 – 225.
9. Gerasimov G.N., Krylov B.E., Loginov A.V., Shhukin S.A. Ul'traioletovoe izlucheniye vzbuzhdennyh molekul inertnyh gazov // Uspehi fizicheskikh nauk. – 1992. – Т. 162. - No. 5. – S. 123-159.

10. Hagen O.F., Obert W.J. Cluster Formation in Expanding Supersonic Jets: Effect of Pressure, Temperature, Nozzle Size, and Test Gas // *J. Chem. Phys.* – 1972. – Vol. 56. - No. 5. – P. 1793.
11. Hagen O.F. Cluster ion sources // *Rev. Sci. Instr.* – 1992. – Vol. 63. - No. 4. – P. 2374.
12. Makarov G.N. Ekstremal'nye processy v klasterah pri stolknovenii s tverdoj poverhnost'ju // *Uspehi fizicheskikh nauk.* – 2006. – T. 176. - No. 2. – S. 121-170.
13. Skibenko E.I., Kruglov S.A., Surkov A.E., Juferov V.B. Ustrojstvo dlja napuska gaza v zamknutuju magnitnuju lovushku. AS No.1019982. Prioritet izobretenija 20.01.1981.
14. Skibenko E.I., Kovtun Ju.V., Egorov A.M., Juferov V.B. Konstruktivnye i tehnologicheskie osobennosti konceptual'nogo proekta ionno-atomnogo separirujushhego ustrojstva na osnove puchkovo-plazmennogo razrjada // *Voprosy atomnoj nauki i tehniki. Serija Fizika radiacionnyh povrezhdenij i radiacionnoe materialovedenie.* – 2009. – No.4-2. – S. 286-292.
15. Skibenko E.I., Maslov A.I., Kozlov V.N., Juferov V.B. Impul'snyj gazodinamicheskij istochnik nejtral'nyh atomov // *Pribory i tehnika eksperimenta.* – 1975. – No.5. – S. 164-166.
16. Skibenko E.I., Maslov A.I., Juferov V.B. Issledovanie prostranstvenno vremennyh karakteristik impul'snoj sverhzvukovoj strui nejtral'nogo gaza // *ZhTF.* – 1976. – T. 46. – S. 1654-1659.
17. Juferov V.B., Skibenko E.I., Il'chenko A.I., Bredihin M.Ju., Maslov A.I. Malogabaritnyj istochnik plotnyh potokov nejtral'nyh chastic // *Pribory i tehnika eksperimenta.* – 1971. – No.1. – S. 183-185.
18. Juferov V.B., Skibenko E.I., Holod Ju.V., Il'chenko A.I. i dr. Issledovanie sverhzvukovyh gazovyh struj s maloj uglovoj rashodimost'ju v vakuume // *ZhTF.* – 1971. – T. 41. - No. 8. – S. 1702-1707.
19. Busol F.I., Skibenko E.I., Juferov V.B. Vlijanie konfiguracii sopla na sverhzvukovoe istechenie gaza v vakuum // *ZhTF.* – 1966. – T. 36. – S. 2154-2160.
20. Stulov V.P. Lekcii po gazovoj dinamike. – M.: Fizmatlit, 2004. – 192 s.
21. Lojczanskij L.G. Mehanika zhidkosti i gaza. – M.: Tehniko-teoreticheskaja literatura, 1950. – 676 s.
22. Abramovich G.N. Prikladnaja gazovaja dinamika: Ch.1. – M.: Nauka, 1991. – 600 s.
23. Krutov V.I. Tehnicheskaja termodinamika. – M.: Vysshaja shkola, 1981. – 439 s.
24. Smirnov B.M. Plavlenie klasterov s parnym vzaimodejstviem atomov // *Uspehi fizicheskikh nauk.* – 1994. – T. 164. - No.11. – S. 1165–1185.
25. Smirnov B.M. Generacija klasternyh puchkov // *Uspehi fizicheskikh nauk.* – 2003. – T. 173. - No.6. – S. 649–665.
26. Karpenko A.Ju., Baturin V.A. Istochniki klasternogo puchka. Chast' 1. Metody poluchenija klasternyh puchkov // *Zhurnal Nano-ta elektronnoj fiziki.* – 2012. – T. 4. - No. 3. S. 03015(13cc).
27. Karpenko A.Ju., Baturin V.A. Istochniki klasternogo puchka. Chast' 2. Formirovanie klasternyh puchkov v soplovyh istochnikah // *Zhurnal Nano-ta elektronnoj fiziki.* – 2012. – T. 4. - No. 4. – S. 04015(15ss).
28. Becker E.W., Bier K., Henkes W. Strahlenaus Kondensierten Atomen und Molekelnim Hochvakuum // *Z. Physik.* – 1956. – Vol. 146. - No. 3. – P. 333-338.
29. Smith R.A., Ditmire T., Tisch J.W.G. Characterization of a cryogenically cooled high-pressure gas jet for laser/cluster interaction experiments // *Rev. Sci. Instr.* – 1998. – Vol. 69. - No. 11. – P. 3798.
30. Farges J., de Feraudy M.F., Raoult B., Torchet G. Noncrystalline structure of argon clusters. II. Multilayer icosahedral structure of Ar_N clusters 50<N<750 // *J. Chem. Phys.*– 1986. – Vol. 84. - No. 6. – P. 3491-3501.
31. Shuvalov V.A., Levkovich O.A., Kochubej G.S. Priblizhennye modeli rascheta istechenija sverhzvukovoj strui gaza v vakuum // *Prikladnaja mehanika i tehniceskaja fizika.* – 2001. – T. 42. - No. 2. – S. 6.
32. Gerasimov Ju.I., Jarygin V.N. Istechenie struj ideal'nogo i real'nyh gazov iz osesimmetrichnyh sopel. Voprosy podobija. 1. Istechenie struj v vakuum // *Fiziko-himicheskaja kinetika v gazovoj dinamike: elektronnyj zhurnal.* – 2012. – T.13. – Vyp.1 – 22 s., <http://chemphys.edu.ru/media/files/2012-07-13-001.pdf>.
33. Avduevskij V.S., Ashratov Je.A., Ivanov A.V., Pirumov U.G. Sverhzvukovye neizobaricheskie strui gaza. – M.: Mashinostronie, 1985. – 248 s.
34. Krygin G.B., Ezhov V.F., Rjabov V.L., Jashhuk V.V. Prilozhenie metoda krupnyh chastic k raschetu parametrov molekulyarnykh puchkov iz gazodinamicheskikh istochnikov // *Pis'ma v ZhTF.*– 1998. – T. 24. - No. 16. – S. 66-72.
35. Dettleff G, Doetcher R.D., Dankert C., et al. Attitude control thruster plume flow modeling and experiments // *J. Spacecraft Rockets.* – 1986. – Vol. 23. - No. 5. – P. 477-481.
36. Majrels G., Mullen D.F. Rasshirenie gazovogo oblaka i giperzvukovoj strui v vakuum // *Raketnaja tehnika i kosmonavtika.* – 1963. – No. 3. – S. 65-72.

PACS: 29.27.-a; 41.75.Ak; 82.80.Yc

APPLICATION OF $^4\text{He}^{2+}$ AND $^3\text{He}^{2+}$ BEAMS OF THE COMPACT ACCELERATOR “СОКОЛ” FOR ION BEAM ANALYSIS

**S.G. Karpus, V.N. Bondarenko, A.V. Goncharov, L.S. Glazunov, A.V. Zats,
V.V. Kuz'menko, V.M. Pistryak, V.I. Sukhostavets**

National Scientific Center “Kharkov Institute of Physics and Technology”

1, Akademicheskaya st., Kharkov 61108, Ukraine

E-mail: goncharov@kipt.kharkov.ua, karpus@kipt.kharkov.ua

Received June 2, 2015

Some planar structures have been studied by $^4\text{He}^{2+}$ ion beam and the backscattering spectrometry. Thicknesses of separate layers were determined in the optical coating consist of 13 alternated Ta_2O_5 and SiO_2 layers on the SiO_2 substrate. Oxygen fraction was measured in VN coating formed by ion beam assisted deposition technique (IBAD) and in Nb_2O_5 coating deposited by laser sputtering. Besides deuterium concentration distribution in titanium deuteride layer on Mo substrate was measured by $^3\text{He}^{2+}$ ion beam and the $\text{D}(^3\text{He},\text{p})^4\text{He}$ nuclear reaction.

KEY WORDS: multiply charged ions, ion beam analysis, backscattering spectrometry, $\text{D}(^3\text{He},\text{p})$ reaction

ЗАСТОСУВАННЯ ПУЧКІВ $^4\text{He}^{2+}$ ТА $^3\text{He}^{2+}$ МАЛОГАБАРИТНОГО ПРИСКОРЮВАЧА “СОКОЛ” ДЛЯ ІОННО-ПУЧКОВОГО АНАЛІЗУ

**С.Г. Карпусь, В.М. Бондаренко, О.В. Гончаров, Л.С. Глазунов, А.В. Зац,
В.В. Кузьменко, В.М. Пістряк, В.І. Сухостаєць**

Національний Науковий Центр “Харківський фізико-технічний інститут”

вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна

За допомогою пучка іонів $^4\text{He}^{2+}$ та спектрометрії зворотного розсіювання проведено дослідження ряду планарних структур. В оптичному покритті, що складається з 13-и почергових шарів Ta_2O_5 та SiO_2 на підкладці з SiO_2 , виміряні товщини окремих шарів. Виміряно вміст кисню в покритті VN, що було сформоване шляхом напилення ванадію на підкладку з одночасним опромінюванням іонами азоту (метод IBAD), та у покритті Nb_2O_5 , нанесеному за допомогою лазерного розпилення. Крім того, за допомогою пучка іонів $^3\text{He}^{2+}$ та ядерної реакції $\text{D}(^3\text{He},\text{p})^4\text{He}$ виміряний розподіл концентрації дейтерію в шарі дейтериду титану, нанесеного на молибденову підкладку.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: багатозарядні іони, аналіз на іонних пучках, спектрометрія зворотного розсіювання, реакція $\text{D}(^3\text{He},\text{p})$.

ПРИМЕНЕНИЕ ПУЧКОВ $^4\text{He}^{2+}$ И $^3\text{He}^{2+}$ МАЛОГАБАРИТНОГО УСКОРИТЕЛЯ “СОКОЛ” ДЛЯ ИОННО-ПУЧКОВОГО АНАЛИЗА

**С.Г. Карпусь, В.Н. Бондаренко, А.В. Гончаров, Л.С. Глазунов, А.В. Зац,
В.В. Кузьменко, В.М. Пистряк, В.И. Сухостаевец**

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина

С помощью пучка ионов $^4\text{He}^{2+}$ и спектрометрии обратного рассеяния проведено исследование ряда планарных структур. В оптическом покрытии, состоящем из 13-и чередующихся слоев Ta_2O_5 и SiO_2 на подложке из SiO_2 , определены толщины отдельных слоев. Измерено содержание кислорода в покрытии VN, сформированном путем напиления ванадия на подложку с одновременным облучением ионами азота (метод IBAD), и в покрытии Nb_2O_5 , наносимом с помощью лазерного распыления. Кроме того, с помощью пучка ионов гелия $^3\text{He}^{2+}$ и ядерной реакции $\text{D}(^3\text{He},\text{p})^4\text{He}$ измерено распределение концентрации дейтерия в слое дейтерид титана, нанесенного на молибденовую подложку.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: многозарядные ионы, анализ на ионных пучках, спектрометрия обратного рассеяния, реакция $\text{D}(^3\text{He},\text{p})$.

Электростатические ускорители (ESA) широко применяются в ядерной физике и ионно-пучковом анализе (IBA). Основным преимуществом таких ускорителей является хорошая стабильность по энергии ионов.

Использование источников многозарядных ионов и, соответственно, увеличение энергии пучков расширяет возможности ESA [1-4], в том числе, в задачах IBA.

Конечно, при этом величины токов многозарядных ионов много меньше токов, получаемых на однозарядных ионах. Так, в условиях газового разряда источника количество ионов He^{2+} на два порядка меньше количества ионов He^+ [5]. Но для ряда методов IBA, например, для спектрометрии резерфордского обратного рассеяния (RBS), величина тока ионного пучка не является существенно ограничивающим фактором.

В общем парке ESA свою “нишу” занимают малогабаритные ускорители горизонтального типа, которые удобны тем, что аналитическую установку на их базе можно разместить в относительно небольшом помещении (25-30 м²). Для таких ускорителей напряжение на высоковольтном кондукторе обычно не превышает 2 МВ. К данному типу ESA относится и ускоритель “Сокол” ННЦ ХФТИ [6].

Целью настоящей работы является исследование распределения химических элементов в ряде образцов, содержащих слоистые планарные структуры, с помощью методик ИВА на пучке двухзарядных ионов гелия ускорителя “Сокол”.

ЭКСПЕРИМЕНТ

В настоящее время ускоритель “Сокол” оснащен новым инжектором с источником пеннинговского типа с холодными катодами и продольной системой извлечения [7], что позволяет генерировать пучки двухзарядных ионов гелия с энергией до 4 МэВ и током до 20 нА на мишени.

Эксперименты по ИВА на пучках ионов $^4\text{He}^{2+}$ и $^3\text{He}^{2+}$ проводились на одном из выходов ускорителя. Детальная схема использовавшихся экспериментальных устройств представлена на рис. 1.

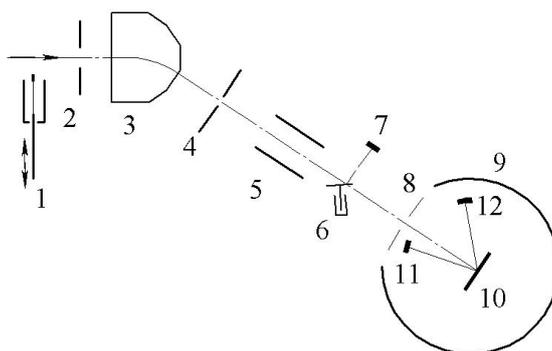


Рис. 1. Схема экспериментальных устройств, расположенных вдоль одного из выходов ускорителя “Сокол”

1 – узел, позволяющий выдвигать тонкую углеродную мишень на траекторию пучка; 2 – диафрагма $\varnothing 5$ мм; 3 – магнитный масс-анализатор (ММА); 4 – стандартный щелевой прибор в системе стабилизации энергии пучка; 5 – электростатический анализатор (ЕА); 6 – механический прерыватель пучка в системе мониторинга количества ионов, падающих на мишень; 7 – детектор, регистрирующий ионы, рассеянные на вращающихся лопастях прерывателя; 8 – щель 0,9x9 мм; 9 – камера для ИВА; 10 – образец-мишень; 11 – детектор, регистрирующий ионы, рассеянные на мишени; 12 – Si(Li) детектор. Стрелка показывает направление пучка после выхода из ускорителя.

В настоящей работе во всех рассмотренных случаях пучок падал на мишень-образец вдоль нормали к его поверхности. Поверхностно-барьерный детектор 11, использовавшийся при измерении спектров обратного рассеяния (ОР) ионов, был установлен под углом $\theta=170^\circ$ по отношению к пучку. Si(Li) детектор, применявшийся для регистрации протонов с энергией порядка 13 МэВ из реакции $\text{D}(^3\text{He},\text{p})^4\text{He}$, был расположен под углом 140° к направлению пучка.

Теоретический и экспериментальный аспекты анализа образцов с помощью спектрометрии ОР (в том числе, RBS и нерезерфордского рассеяния) подробно изложены в ряде обзоров [8-11].

При выделении из общего ионного пучка, выходящего из ускорителя, двухзарядных ионов ^4He с энергией E_0 с помощью ММА проявляется эффект одновременного выделения и однозарядных ионов молекулярного водорода с энергией $E_0/2$. Эта “примесь” ионов H_2^+ возникает из-за присутствия остаточного газа H_2 в ионном источнике, которое обусловлено гажением конструкционных материалов источника, а также присутствием паров воды в остаточной атмосфере [12].

В настоящее время для снижения относительного содержания ионов H_2^+ в пучке ионов $^4\text{He}^{2+}$, падающем на мишень, нами используются две методики: а) диссоциация молекулярного пучка на тонкой углеродной пленке, установленной перед ММА; б) выделение пучков H_2^+ и $^4\text{He}^{2+}$ в поперечном поле ЕА, установленного после ММА. В последнем случае доля ионов H_2^+ в пучке ионов, падающих на мишень, составляет около 3%. Подробно результаты соответствующих экспериментов были представлены в работе [13].

Первая методика обеспечивает несколько больший эффект при очищении пучка ионов $^4\text{He}^{2+}$ от сопутствующих ионов H_2^+ , но при этом имеет место увеличение энергетического разброса в пучке, падающем на мишень, что нежелательно при использовании спектрометрии ОР. Поэтому в настоящей работе для очистки пучка применялась вторая методика.

Нужно отметить, что для ряда методик ИВА примесь ионов H_2^+ в пучке ионов $^4\text{He}^{2+}$ может не являться существенно мешающим фактором. Так, при использовании спектрометрии ОР, лишь в низкоэнергетической части спектра, которая составляет примерно 25-30% всего энергетического диапазона регистрируемых рассеянных ионов, наблюдается наложение спектров ОР ионов водорода и гелия. Соответственно, высокоэнергетическая часть спектра, в которой регистрируются только обратно рассеянные ионы гелия, может быть проанализирована обычным образом.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ И ОБСУЖДЕНИЕ

Далее рассмотрены некоторые примеры использования пучка двухзарядных ионов гелия на ускорителе “Сокол” для изучения распределений химических элементов по глубине образцов.

Исследование многослойного покрытия Ta₂O₅/SiO₂/Ta₂O₅/.../Ta₂O₅ на подложке из SiO₂

Покрывание было получено с помощью поочередного осаждения оксидов Ta₂O₅ и SiO₂ на образец. Такого рода покрытия используются достаточно широко. В частности, они находят применение при создании лазерных интерферометров и оптических фильтров [14,15].

В нашем случае слои наносились с помощью лазерного распыления в высоковакуумной камере. Всего на исследуемый образец было попеременно нанесено 7 слоев Ta₂O₅ и 6 слоев SiO₂. Ниже (в том числе на рис. 2) в общей нумерации нанесенных слоев, начиная с внешнего, к слоям Ta₂O₅ относятся нечетные номера, а к слоям SiO₂ – четные. Таким образом, при осаждении первым наносился 13-й слой, а последним – 1-й.

Образец исследовался с помощью спектрометрии ОР. На рис. 2 представлены спектры ОР ионов от данного образца, измеренные с применением пучков однозарядных и двухзарядных ионов гелия при приблизительно одинаковом значении напряжения на высоковольтном кондукторе ускорителя – около 1,5 МВ.

Низкоэнергетическая часть экспериментального спектра “b” (область каналов 30-170) представляет собой суперпозицию спектров ОР ионов ⁴He и ионов H⁺, поскольку очистка примеси ионов H₂⁺ от основного пучка ⁴He²⁺ с помощью ЕА не дает стопроцентный результат (если не приносить в жертву интенсивность тока основного пучка). Особенностью этой части спектра является группа из 7-и узких пиков, соответствующих рассеянию ионов H⁺ на тантале, входящем в состав вещества слоев Ta₂O₅ (область каналов 80-170). Но в данном случае эта часть спектра практически не добавляет информации в отношении исследуемого образца, по сравнению с информацией, извлекаемой из высокоэнергетической части спектра (170-650 кан.), связанной с рассеянием исключительно ионов гелия.

Спектр “b” измерялся при энергии, несколько меньшей энергии 3,034 МэВ резонанса упругого рассеяния ионов ⁴He на ядрах ¹⁶O [16], чтобы свести к минимуму присутствие нерегулярностей в спектре.

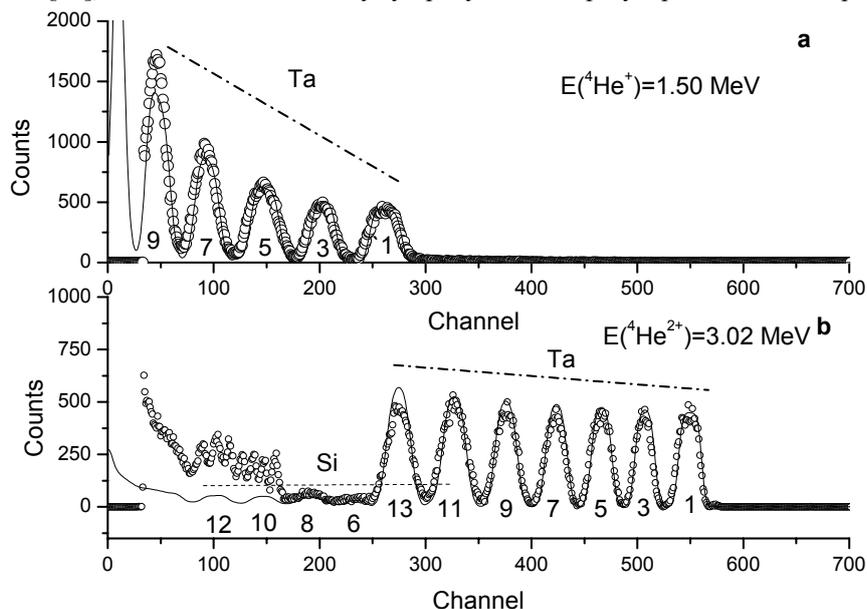


Рис. 2. Энергетические спектры ионов, обратно рассеянных на многослойном покрытии Ta₂O₅/SiO₂/.../Ta₂O₅/SiO₂. а – спектр, полученный при использовании пучка однозарядных ионов ⁴He, b – спектр, полученный при использовании двухзарядных ионов.

В обоих спектрах (рис. 2) сплошная линия представляет собой результат подгонки с помощью моделирования спектров ОР ионов гелия. Спецификой данной задачи является то, что каждый из пиков в спектрах соответствует определенному химическому элементу из определенного слоя в покрытии. В соответствии с этим и дана маркировка пиков (цифры относятся к номерам нанесенных слоев в их общей последовательности, начиная с внешнего слоя). В обоих спектрах штрих-пунктирной линией над пиками выделена область, в которой регистрируются ионы гелия, рассеянные на ядрах атомов Ta из слоев Ta₂O₅. Кроме того, в спектре “b” пунктирной линией выделена область, в которой регистрируются ионы гелия, рассеянные на Si из слоев SiO₂.

В спектре “a” и высокоэнергетической части спектра “b” (область каналов 180-600), относящейся только к ОР ионов гелия, слои Ta₂O₅ покрытия проявляются в виде отдельных друг от друга пиков, каждый из которых соответствует определенному диапазону энергий регистрируемых ионов ⁴He, рассеянных на ядрах атомов ¹⁸¹Ta. Слоям, которые ближе к внешней поверхности образца, соответствуют в спектрах большие энергии рассеянных

ионов. Промежутки с минимальным выходом ОР между этими пиками связаны с потерей энергии ионов первичного пучка и рассеянных ионов в слоях SiO_2 , в которых тантал отсутствует.

Можно видеть, что в спектре “b” проявляются все 7 слоев нанесенного Ta_2O_5 , в то время как в спектре “a” проявляются лишь 5 “верхних” слоев Ta_2O_5 , что в последнем случае связано с недостаточной глубиной анализа при использовании пучка однозарядных ионов гелия с энергией 1,5 МэВ.

Кроме того, в спектре “a” слои SiO_2 вообще непосредственно не проявляются, а в экспериментальном спектре “b” (см. область 170-250 кан.) ряд таких слоев (8-й и 6-й в общей нумерации слоев) проявляются в виде небольших пиков, соответствующих рассеянию ионов гелия на ядрах атомов Si, входящих в состав вещества этих слоев. Малая величина этих пиков по сравнению с пиками рассеяния на Ta связана с гораздо меньшей величиной сечения рассеяния ионов гелия на ядрах атомов Si по сравнению с сечением рассеяния на ядрах атомов Ta.

В связи с еще меньшей величиной сечения рассеяния ионов гелия на ядрах атомов кислорода, в спектре “b” совсем не проявляются вариации выхода рассеяния, связанные с разным содержанием кислорода в слоях Ta_2O_5 и SiO_2 .

При обработке спектров “a” и “b” в качестве внешнего стандарта использовался образец из чистого Ta. Обработка проводилась по обычной процедуре путем сравнения экспериментального спектра с модельным.

Моделирование спектров ОР ионов гелия проводилось в предположении, что сечения рассеяния описываются формулой Резерфорда с учетом поправки на экранировку ядра электронами оболочками атома [17], а траектории иона до рассеяния на ядре какого-либо атома и после рассеяния являются прямолинейными. Как обычно, при моделировании учитывались конечно энергетическое разрешение спектрометра и эффект энергетического страгглинга ионов, который усиливается по мере продвижения ионов сквозь вещество.

Применительно к настоящей задаче исследования многослойного покрытия, при моделировании спектров предполагалось, что каждый слой покрытия состоит из оксида стехиометрического состава (Ta_2O_5 или SiO_2). Это позволило уменьшить число подгоночных параметров модели, поскольку в данном случае таковыми были только искомые толщины слоев.

На рис. 2b модельный спектр рассеянных ионов гелия распространен на всю область энергий. Можно видеть, что 12-й и 10-й слои, содержащие SiO_2 , проявляются только в модельном спектре. В экспериментальном же спектре они не проявляются из-за интенсивного выхода рассеяния ионов H^+ в этой части спектра. Кроме того, как в экспериментальном, так и в модельном спектрах не проявляются 4-й и 2-й слои SiO_2 , что связано с наложением соответствующих пиков малой интенсивности на интенсивные пики, связанные с рассеянием на Ta, входящем в состав 13-го и 11-го слоев.

В спектрах, представленных на рис. 2, можно видеть, что по мере уменьшения энергии регистрируемых ионов гелия (т.е. по мере заглупления пучка в вещество мишени), степень совпадения между экспериментальным и модельным спектрами несколько ухудшается. Так, в спектре “b” качество подгонки на пике, соответствующем слою 13, несколько хуже качества подгонки, соответствующего слою 1. Аналогично, в спектре “a” качество подгонки на пике, соответствующем слою 9, хуже качества подгонки, соответствующего слою 1. Этот эффект является обычным для алгоритмов, используемых при подгонке спектров ОР, и, в основном, связан с тем, что в таких алгоритмах предполагается прямолинейность траекторий ионов при их продвижении в веществе. В реальности же, траектории ионов не являются строго прямолинейными, а претерпевают отклонения в результате воздействия такого статистического процесса, как многократное рассеяние.

В таблице представлены результаты обработки спектров “a” и “b”. В скобках указаны толщины слоев в мкм, рассчитанные, исходя из плотности SiO_2 , получаемого термическим путем ($2,3 \text{ г/см}^3$) и плотности β -фазы Ta_2O_5 , которая является равновесной при комнатной температуре ($8,2 \text{ г/см}^3$).

Таблица

Толщины отдельных слоев многослойного покрытия $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{SiO}_2/\dots/\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{SiO}_2$, определенные с помощью спектрометрии обратно рассеянных ионов гелия.

Номер слоя	Стехиометрический элементный состав	Энергия ионов $E(^4\text{He}^+) = 1,50 \text{ МэВ}$		Энергия ионов $E(^4\text{He}^{2+}) = 3,02 \text{ МэВ}$	
		Толщина слоя, 10^{18} ат./см^2 (мкм)		Толщина слоя, 10^{18} ат./см^2 (мкм)	
1	Ta_2O_5	1,3 (0,17)		1,2 (0,13)	
2	SiO_2	1,7 (0,25)		1,7 (0,25)	
3	Ta_2O_5	1,0 (0,11)		1,0 (0,11)	
4	SiO_2	1,5 (0,22)		1,6 (0,23)	
5	Ta_2O_5	1,1 (0,12)		1,0 (0,11)	
6	SiO_2	1,5 (0,22)		1,6 (0,23)	
7	Ta_2O_5	1,0 (0,11)		1,0 (0,11)	
8	SiO_2	1,3 (0,19)		1,8 (0,26)	
9	Ta_2O_5	1,2 (0,13)		1,0 (0,11)	
10	SiO_2	–		1,7 (0,25)	
11	Ta_2O_5	–		1,0 (0,11)	
12	SiO_2	–		1,8 (0,26)	
13	Ta_2O_5	–		1,0 (0,11)	

Можно видеть, что величины измеренных толщин для слоев Ta₂O₅ являются близкими, хотя толщина 1-го (внешнего) слоя несколько больше толщин других слоев (это проявляется и в несколько большей полуширине 1-го пика в спектре “а”).

Для первых семи слоев результаты измерения толщин слоев Ta₂O₅ и SiO₂, полученные при разных энергиях анализирующего пучка, также являются близкими. При этом величины толщин 8-го и 9-го слоев, полученные при энергии ионов 1,5 МэВ, можно считать менее достоверными, поскольку им соответствуют существенный сброс энергии ионов пучка и возрастающая при этом неопределенность в величине тормозной способности ионов (это проявляется и в качестве подгонки пика, относящегося к 9-му слою, в спектре “а”).

Из спектра “b” можно видеть, что в отличие от подгонок на пиках, соответствующих слоям Ta₂O₅ от 1-го по 11-й, на пике, соответствующем 13-му слою, наблюдается заметное расхождение между экспериментальным и модельным спектрами. Причина этого не ясна (возможно, это связано с влиянием шероховатости исходной поверхности подложки), но можно считать, что полученное значение толщины 13-го слоя (см. табл.) является наименее точным.

В целом можно сделать вывод, что применение пучка двухзарядных ионов гелия позволило получить больше информации при исследовании данной многослойной структуры, чем при использовании “штатного” пучка однозарядных ионов гелия.

Исследование покрытия из пористого VN

Образец представлял собой пленку из нитрида ванадия, нанесенную с помощью напыления ванадия на подложку из графита с одновременным облучением образца ионами азота (метод IBAD [18-20]). Толщина пленки составила 0,12 мкм. Особенностью материала пленки был высокий уровень пористости, который обеспечивается за счет примеси некоторого инертного газа в ионном источнике. Такого рода пленки являются перспективными с точки зрения создания материалов, способных удерживать значительные количества водорода [21]. В данном случае в качестве инертного газа использовался неон, который наряду с азотом напускался в объем ионного источника. Пористость вещества пленки измерялась по методике, сочетающей измерение линейной толщины пленки с помощью профилометра и массовой толщины с помощью спектрометрии RBS [21]. Измеренная величина пористости составила 27 %.

Графит в качестве подложки обеспечивал наименьшую степень влияния на высокоэнергетическую часть спектров ОР, связанную с самим материалом пленки, анализ которой и был целью исследования.

На рис. 3 представлены спектры ОР ионов гелия от данного образца, измеренные при разных энергиях пучка.

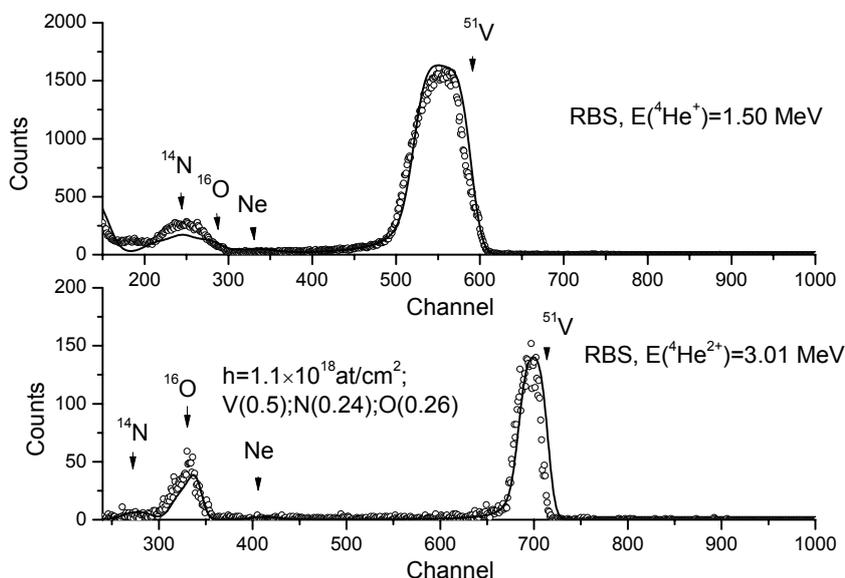


Рис. 3. Спектры обратного рассеяния ионов гелия от пленки из пористого нитрида ванадия, измеренные на пучках однозарядных и двухзарядных ионов ⁴He.

В обоих спектрах сплошная линия представляет собой результат подгонки с помощью моделирования спектров ОР ионов гелия. Результаты обработки (толщина пленки *h* и относительные атомные соотношения между компонентами вещества пленки) представлены в комментариях ко второму спектру.

Можно видеть, что во втором спектре, измеренном на пучке двухзарядных ионов гелия при большей энергии, достигается полное разделение пиков ОР, соответствующих азоту и кислороду вещества пленки.

Внедренный неон практически не проявился в спектрах ОР. Это означает, что его содержание в веществе пленки весьма мало.

Обращает на себя внимание необычно высокое содержание кислорода в пленке. Возможно, это является следствием высокой степени пористости пленки и окисления поверхности пор кислородом, проникшим в пленку из внешней атмосферы диффузионным путем.

Исследование покрытия Nb_2O_5 на подложке из SiO_2

Покрывание осаждалось на подложку с помощью лазерного распыления оксида ниобия в высоковакуумной камере. Такого рода покрытия, наряду с рассмотренными выше покрытиями из Ta_2O_5 , также используются в оптических устройствах [22].

Задачей настоящего исследования было определение содержания кислорода в покрытии, поскольку нельзя было исключить, что при распылении имеет место некоторое изменение стехиометрии вещества покрытия по сравнению с классической стехиометрией.

Для исследования была выбрана методика, основанная на резонансе $E_{res}=3,034$ МэВ упругого рассеяния ионов ^4He на ядрах ^{16}O . В работе [16] дифференциальное сечение рассеяния в окрестности данного резонанса было измерено для угла $170,5^\circ$ в лабораторной системе координат и показано, что в максимуме сечения его величина в 23 раза превосходит резерфордское значение сечения. Ширина резонанса составляет около 15 кэВ. Эта методика неоднократно применялась при измерении концентрационных профилей кислорода [23].

На малогабаритном ускорителе “Сокол” энергии, необходимой для данной методики, можно достичь только при использовании пучка двухзарядных ионов ^4He . Для того, чтобы выбрать энергию ионов $^4\text{He}^{2+}$, оптимальную для анализа кислорода в пленке Nb_2O_5 , предварительно измерялся спектр ОР при энергии ионов 3,00 МэВ, т.е. несколько ниже резонанса 3,034 МэВ упругого рассеяния $^{16}\text{O}(\alpha,\alpha)$. Величина толщины пленки, определенная из спектра, составила $1,0 \cdot 10^{18}$ ат./см². Исходя из этого значения, расчетная величина сброса энергии пучка ионов гелия в данной пленке при энергии ионов, равной или близкой к E_{res} составила примерно $\Delta E=43$ кэВ, что по порядку величины сравнимо с шириной данного резонанса. Измерение содержания кислорода в пленке Nb_2O_5 будет корректным, если максимум выхода ОР ионов гелия на ядрах ^{16}O будет соответствовать слою вещества пленки, который достаточно удален от обеих ее поверхностей. Проще всего энергию пучка выбрать близкой к значению $E_{res}+\Delta E/2$. В нашем случае использовалась энергия 3,050 МэВ.

На рис. 4 представлен соответствующий спектр ОР ионов гелия. На рисунке не показана “неинформативная” для нашей задачи низкоэнергетическая часть спектра, в которой происходит наложение спектров ОР ионов гелия и водорода.

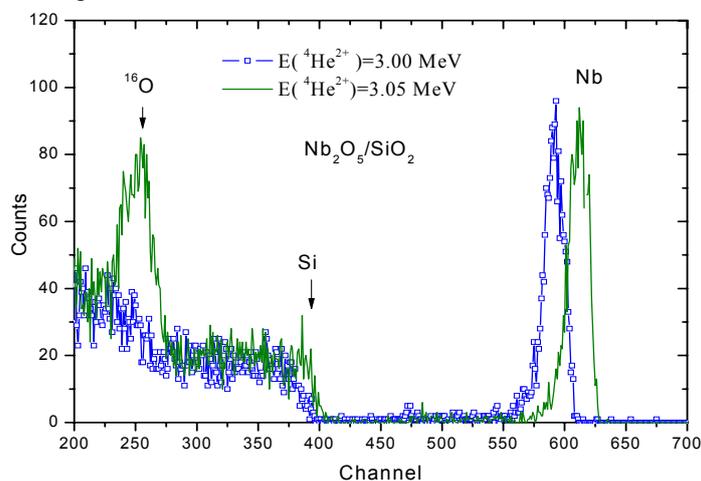


Рис. 4. Спектры обратного рассеяния ионов гелия от пленки Nb_2O_5 на подложке SiO_2 . В качестве первичного пучка использовался пучок $^4\text{He}^{2+}$.

Поскольку измерения спектров ОР проводились при несколько отличающихся энергиях первичного пучка, спектры сдвинуты относительно друг друга. В высокоэнергетической области спектров можно видеть пик, соответствующий рассеянию на ядрах атомов Nb, входящих в состав вещества пленки. Кроме того, в спектрах наблюдается ступенька-континуум, соответствующая рассеянию на ядрах атомов Si из состава вещества подложки. Второй спектр отличается от первого присутствием интенсивного пика, соответствующего резонансному рассеянию ионов гелия на ядрах атомов ^{16}O , входящих в состав вещества пленки. Как образец-стандарт для анализа кислорода использовался оксид кремния SiO_2 , содержание кислорода в котором составляет $c^{st}=53,26$ масс. %.

Применительно к геометрии системы пучок – образец – детектор, которая использовалась в настоящей работе (см. выше раздел “Эксперимент”), выражение для массового содержания кислорода в веществе покрытия образца, анализируемом с помощью данной методики, принимает вид:

$$c = c^{st} \frac{kS_m(E_{res}) + \frac{1}{|\cos \theta|} S_m(kE_{res})}{kS_m^{st}(E_{res}) + \frac{1}{|\cos \theta|} S_m^{st}(kE_{res})} \frac{Q}{Q^{st}}, \quad (1)$$

где $k=k(\theta)$ – кинематический фактор для упругого рассеяния иона ${}^4\text{He}$ на ядре атома ${}^{16}\text{O}$ при угле рассеяния θ ; $S_m(E)$ и $S_m^{st}(E)$ – соответственно, величины массовых тормозных способностей ($\text{МэВ}\cdot\text{см}^2/\text{мг}$) ионов гелия в веществе образца и стандарта как функции энергии E ионов; Q и Q^{st} – площади пиков, соответствующих используемому резонансу ${}^{16}\text{O}(\alpha,\alpha)$ в спектрах ОР, измеренных на образце и стандарте при одинаковых экспозициях и энергиях пучка.

В результате обработки спектрометрической информации получено следующее соотношение атомных концентраций ниобия и кислорода: $\text{Nb}(\text{2})\text{O}(\text{5},\text{1})$, что близко к теоретическому стехиометрическому соотношению.

Исследование распределения дейтерия в покрытии из дейтерида титана на подложке из молибдена

Приведенные выше примеры относились к использованию спектрометрии упруго рассеянных ионов ${}^4\text{He}$. Но для некоторых прикладных задач возникает необходимость и в использовании пучка ионов ${}^3\text{He}$. Например, для нахождения распределения дейтерия в приповерхностном слое образцов применяется резонанс ядерной реакции $\text{D}({}^3\text{He},\text{p}){}^4\text{He}$ с максимумом при энергии $E_{res}=0,69$ МэВ [10]. Ширина резонанса на его полувысоте составляет 0,72 МэВ. Резонанс является существенно несимметричным относительно максимума: уменьшение сечения реакции вдвое относительно максимума достигается при энергии 0,69-0,26 МэВ с низкоэнергетической стороны резонанса и при энергии 0,69+0,46 МэВ – с высокоэнергетической стороны.

В частности, методика с использованием этого резонанса применяется для нахождения распределения дейтерия в первой стенке термоядерных установок [24].

Предметом настоящего исследования была специальная мишень, выполненная на основе покрытия из дейтерида титана TiD_x на подложке из молибдена. Такие мишени используются для генерации потоков нейтронов с помощью реакции $\text{D}(\text{d},\text{n}){}^3\text{He}$. Обычно параметр x изменяется в пределах от 0,8 до 1,8, поскольку при $x=2$, т.е. при переходе к дигидриду титана, наступает сильное охрупчивание вещества покрытия.

Предварительно с помощью спектрометрии ядер отдачи на пучке ионов ${}^4\text{He}^+$ (метод ERDA) было определено, что в исследуемом покрытии нет примеси изотопа ${}^1\text{H}$ в заметном количестве, а из спектрометрии ОР протонов была найдена толщина покрытия 4,28 мкм.

Основной целью настоящего исследования было измерение концентрационного распределения дейтерия по глубине покрытия. Расчет показал, что если для этой цели использовать пучок однозарядных ионов ${}^3\text{He}$ с энергией до 2 МэВ, то глубина анализа не превысит 3,7 мкм, что меньше найденной толщины покрытия. Поэтому для измерения данного распределения использовался пучок двухзарядных ионов ${}^3\text{He}$. При измерениях ток пучка составлял 3-7 нА.

Для определения концентрации дейтерия в покрытии в качестве стандарта использовался образец с известной стехиометрией $\text{TiD}_{1,7}$.

При измерении концентрационного профиля дейтерия проводилось сканирование по энергии E_0 анализирующего пучка ионов ${}^3\text{He}^{2+}$ в пределах от 1,0 до 3,0 МэВ и измерение выхода протонов из реакции $\text{D}({}^3\text{He},\text{p}){}^4\text{He}$ как на образце, так и на стандарте.

В каждой точке профиля массовая концентрация дейтерия определялась из выражения

$$c = c^{st} \frac{Y}{Y^{st}} \frac{S_m(E_{res})}{S_m^{st}(E_{res})}, \quad (2)$$

где c^{st} – массовая концентрация дейтерия в веществе стандарта; Y и Y^{st} – соответственно, выход протонов, измеренный на образце и стандарте; $S_m(E_{res})$ и $S_m^{st}(E_{res})$ – массовые тормозные способности ионов ${}^3\text{He}$ в веществе образца на данной глубине и в веществе стандарта. Ввиду того, что величина $S_m(E_{res})$ зависит от элементного состава анализируемого вещества, т.е. от той же искомой концентрации c , то для корректного вычисления концентрации дейтерия с помощью выражения (2) использовался метод последовательных приближений. В дальнейшем массовое содержание дейтерия пересчитывалось в параметр x , характеризующий анализируемое вещество покрытия TiD_x . Поскольку при измерениях пучок падал по нормали к поверхности мишени, то глубина, соответствующая максимуму выхода реакции для данной энергии E_0 ионов и искомой концентрации дейтерия, определялась как разность проективных пробегов ионов $R_p(E_0)-R_p(E_{res})$. При расчете тормозных способностей и проективных пробегов использовался код SRIM [25].

Для пересчета массового значения глубины в линейное значение использовалась экспериментальная величина плотности TiH_2 3,76 г/см³ [26], которая применительно к нашему случаю с внедренным дейтерием была скорректирована до величины 3,91 г/см³ в предположении от том, что параметры кристаллической

решетки вещества не изменяются при замене одного изотопа водорода на другой, и с учетом известного соотношения между массами изотопов ^1H и D .

Расчет показал, что при вычислении погрешности определения глубины в покрытии можно не учитывать энергетический страгглинг-ионов, поскольку во всем диапазоне энергий пучка и соответствующих глубин величина страгглинга существенно меньше энергетической ширины самого резонанса. Таким образом, величины данной погрешности определяются параметрами используемого резонанса реакции. Общее разрешение по глубине в покрытии TiD_x составило примерно 1,5 мкм и обусловлено энергетической шириной резонанса.

На рис. 5 представлен измеренный концентрационный профиль дейтерия.

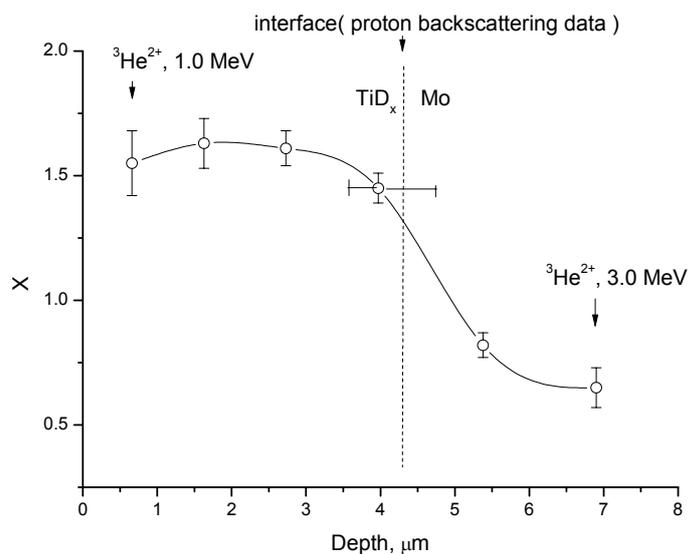


Рис. 5. Распределение дейтерия по глубине покрытия TiD_x на молибденовой подложке.

В качестве ординаты выбран стехиометрический параметр x . Вертикальные “усы” демонстрируют только статистическую среднеквадратичную погрешность.

На рис. 5 горизонтальные усы, демонстрирующие погрешность определения глубины, несимметричны, поскольку, как указано было выше, резонанс является существенно несимметричным относительно максимума.

Экспериментальная зависимость демонстрирует достаточно однородное распределение дейтерия по глубине покрытия. Среднее значение стехиометрического параметра x в области плато составляет 1,6.

Величина глубины, соответствующей перегибу в распределении дейтерия, близка к значению 4,3 мкм толщины данного покрытия, определенному независимо с помощью спектрометрии ОР протонов.

Из данной зависимости не следует делать вывод, что дейтерий проникает и в вещество подложки, поскольку растворимость водорода и дейтерия в молибдене крайне низка [26]. Кажущееся “расплывание” распределения дейтерия на границе раздела покрытие/подложка обусловлено конечным разрешением по глубине используемой методики.

ВЫВОДЫ

Таким образом, применение пучка двухзарядных ионов гелия на малогабаритных электростатических ускорителях позволяет расширить возможности используемых методик ионно-пучкового анализа за счет двукратного увеличения энергии ионов и, соответственно, увеличения глубины анализа. В частности, это относится к исследованию покрытий с помощью обратного рассеяния ионов и ядерных реакций. Кроме того, в спектрометрии обратного рассеяния это позволяет увеличить разрешение по массам. Все это было продемонстрировано в настоящей работе на ряде примеров исследования слоистых планарных структур.

Представляется, что использованные методики могут быть полезными при анализе подобных структур, особенно на стадии отработки технологии их нанесения.

В настоящее время ускорители серии “Сокол”, разработанной в ХФТИ, успешно применяются и в других научно-исследовательских центрах, в частности, в Ташкенте (НИИ прикладной физики ТашГУ, Узбекистан), Черногловке (Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН), Сумах (Институт прикладной физики НАН Украины). Можно надеяться, что наш опыт модернизации такой установки в ННЦ ХФТИ в направлении использования двухзарядных пучков может оказаться полезным и для вышеупомянутых центров.

Авторы выражают благодарность своим коллегам Плукису А. (Институт физики, г. Вильнюс, Литва) и Гугле А.Г. (ННЦ ХФТИ) за плодотворные дискуссии по отдельным направлениям исследований, представленных в настоящей работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Heinicke E., Hellebold J.M., Weber A. Preliminary results with a Penning ion source on a 5.5 MV Van de Graaff accelerator // Nucl. Instrum. and Meth. - 1975. - Vol.124. - P.301-303.
2. Mistra S.N., Gupta S.K., Mehta M.K. Installation of pre-injection ion source-Z/M analyzer system on the 5.5 MV Van de Graaff accelerator at Trombay // Nucl. Instrum. and Meth. - 1976. - Vol.135. - P.477-481.
3. Grimshaw J.A. Use of $^3\text{He}^{++}$ in RBS analysis of CMT and related epilayers // Vacuum. - 1984. - Vol.24. - No.12. - P.1097-1098.
4. Bartha L., Kiss A.Z., Koltay E., Szabo Gy. Light heavy-ion and molecular beams from a radio-frequency ion source // Nucl. Instrum. and Meth.-1990.-Vol.A287.-P.156-160.
5. Towle J.H., Howe F.A., James G. Production of a nanosecond-pulsed He^{++} beam from a 5.5 MV Van de Graaff // Nucl. Instrum. and Meth. - 1968. - Vol.62. - P.77-81.
6. Batvinov L.P., Vergunov A.D., Glazunov L.S., Zac A.V., Levchenko Ju.Z., Novikov M.T., Pistrjak V.M., Storizhko V.E., Chekanov S.Ja. Malogabaritnyj elektrostatičeskij uskoritel' na 2 MjeV gorizontalnogo tipa (predvaritel'nye ispytanija) // Voprosy atomnoj nauki i tehniki. Serija: Tehnika fizičeskogo eksperimenta. - Moskva. - CNIAtominform. - 1985. - Vyp.1(22). - S.26-28.
7. Glazunov L.S., Zats A.V., Karpus S.G., Kuz'menko V.V., Pistryak V.M. Multi-charged ion source // Problems of Atomic Science and Technology, Series "Nuclear Physics Investigations" (55). - 2011. - No.3(73). - P.68-74.
8. Komarov F.F., Kumahov M.A., Tashlykov I.S. Nerazrushajushhij analiz poverhnostej tverdyh tel ionnymi puchkami. -Minsk: Izd-vo "Universitetskoe", 1987. - 256s.
9. Feldman L., Majer D. Osnovy analiza poverhnosti i tonkih plenok. - M.: Mir, 1989. - 342 s.
10. Tesmer J.R., Nastasi M. (Eds.) Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis. MRS-Materials research Society. Pittsburgh, PA, 1995. - 704 p.
11. Malmqvist K.G. Accelerator-based ion beam analysis – an overview and prospects // Radiat. Phys. Chem. - 2004. - Vol.71. - P.817-827.
12. Roberson N.R., Tilley D.R., Weller H.R. The acceleration of doubly-ionized He^{3+} // Nucl. Instrum. and Meth. - 1965. - Vol.33. - P.84-86.
13. Karpus S.G., Goncharov A.V., Pistryak V.M., Zats A.V., Kuz'menko V.V., Bondarenko V.N., Sukhostavets V.I., Glazunov L.S. $^4\text{He}^{2+}$ and H_2^+ ion beam separation on "Sokol" IBA facility // Problems of Atomic Science and Technology, Series "Nuclear Physics Investigations" (64). - 2015. - No.3(97). - P.95-98.
14. Parmentier R., Lemarchand F., Cathelinaud M., Lequime M., Amra C., Labat S., Bozzo S., Bocqet F., Charaf A., Tomas O., Dominici C. Piezoelectric tantalum pentoxide studied for optical tunable applications // Appl. Opt.-2002. - Vol.41. - No.16. - P.3270-3276.
15. Yoon S.G., Kang S.M., Yoon D.H. Residual stress and optical properties in a past-annealed $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{SiO}_2$ multilayer prepared by using dual-ion-beam sputtering // J. Korean Phys. Soc. - 2006. - Vol.49. - No.1. - P.237-240.
16. Leavitt J.A., McIntyre L.C., Ashbaugh M.D., Oder J.G., Lin Z., Dezfouly-Arjomondy B. Cross sections for 170.5° backscattering of ^4He from oxygen for ^4He energies between 1.8 and 5.0 MeV // Nucl. Instrum. and Meth. - 1990. - Vol.B44. - P.260-265.
17. Andersen H.H., Besenbacher F., Loftager P., Moller W. Large-angle scattering of light ions in the weakly screened Rutherford region // Phys. Rev. - 1980. - Vol.21. - P.1891-1901.
18. Cuomo J.J., Rosnagel S.M. Property modification and synthesis by low energy particle bombardment concurrent with film growth // Nucl. Instr. and Meth. - 1987. - Vol.B19/20. - P.963-974.
19. Smidt F.A. Use of ion beam assisted deposition to modify the microstructure and properties of thin films // International Materials Reviews. - 1990. - Vol.35. - No.2. - P.61-128.
20. Vasilenko R.L., Goncharov A.V., Guglja A.G., Karpus' S.G., Litvinenko M.A. O mehanizme formirovanija VN pokrytij v uslovijah bombardirovki ionami azota // Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye i neytronnye issledovanija. - 2008. - No.11. - S.81-87.
21. Goncharov A., Guglya A., Melnikova E. On the feasibility of developing hydrogen storage capable of adsorption hydrogen both in its molecular and atomic states // International journal of hydrogen energy. - 2012. - Vol.37. - Iss.23. - P.18061-18073.
22. Tolenis T., Gaspariunas M., Lelis M., Plukis A., Buzelis R., Melninkaitis A. Assessment of effective-medium theories of ion-beam sputtered $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{-SiO}_2$ and $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ mixtures // Lith. J. Phys. - 2014. - Vol.54. - No.2. - P.99-105.
23. Mezey G., Kotal E., Revesz P., Manuaba A., Lohner T., Gyulai J., Fried M., Vizkelethy Gy., Paszti F., Battistig G., Somogyi M. Enhanced sensitivity of oxygen detection of 3.045 MeV (α,α) elastic scattering and its applications // Acta Phys. Hung. - 1985. - Vol.58. - P.39-55.
24. Rubel M., Wienhold P., Hildebrandt D. Ion beam analysis methods in the studies of plasma facing materials in controlled fusion devices // Vacuum. - 2003. - Vol.70. - P.423-428.
25. Ziegler J.F. SRIM program. Available from: <<http://www.srim.org/>>.
26. Antonova M.M. Svoystva gidridov metallov. - Kiev: Naukova dumka, 1975. - 128 s.

(blank line)

(blank line)

PACS: Here you must specify PACS codes

(blank line)

INSTRUCTIONS FOR PREPARING MANUSCRIPT (TITLE)

(blank line)

N.N. Author¹, N.N. Co-author(s)²

¹*Affiliation*

²*Affiliation (if different from Authors affiliation)*

e-mail: corresponding_authors@mail.com

Received January 14, 2014

(blank line)

Each paper must begin with an abstract. The abstract should be typed in the same manner as the body text (see below). Please note that these Instructions are typed just like the manuscripts should be. The abstract must have at least 500 phonetic symbols, supplying general information about the achievements, and objectives of the paper, experimental technique, methods applied, significant results and conclusions. Page layout: the text should be printed on the paper A4 format, at least 3 pages, with margins of: Top - 3, Bottom, Left and Right - 2 cm. The abstract should be presented in English (only for foreign authors), Ukraine and Russian.

KEYWORDS: there, must, be, at least, 5 keywords

(blank line)

This is introduction section. This paper contains instructions for preparing the manuscripts. The text should be prepared in .doc format (using MS Word).

(blank line)

INSTRUCTIONS

The text should be typed as follows:

- title: Times New Roman, 12 pt, ALL CAPS, bold, 1 spacing, centered;
- authors: name, initials and family names; Times New Roman, 12 pt, bold, 1 spacing, centered;
- affiliation(s): Times New Roman, 9 pt, italic, 1 spacing, centered;
- abstract: Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, justified;
- body text: Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, justified; paragraphs in sections should be indented right (tabulated) for 0.75 cm;
- section titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering, one line should be left, blank above section title;
- subsection titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering in accordance to the section (see below), one line should be left blank above subsection title;
- figure captions: width of the figure should be 85 or 170 mm, figures should be numbered (Fig. 1) and titled below figures using sentence format, Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line); one line should be left blank below figure captions;
- table captions: width of the table should be 85 or 170 mm, tables should be numbered (Table 1.) and titled above tables using sentence format, Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line), tables should be formatted with a single-line box around the outside border and single ruling lines between rows and columns; one line should be left blank below tables;
- equations: place equations centered, numbered in Arabic (1), flush right, equations should be specially prepared in MathType; one line should be left blank below and above equation.

(blank line)

Additional instructions

Numerated figures and tables should be embedded in your text and placed after they are cited. Only black and white drawings and sharp photographs are acceptable. Letters in the figures should be 3 mm high. The figures should be presented in one of the following graphic formats: jpg, gif, pcx, bmp, tif.

(blank line)

REFERENCES

Titles of Journals, articles and author names in References should be given in Roman script. References should be numbered in the order of referring in the text, e.g. [1], [2-5], etc. Do not superscript your reference numbers. Cite references as in journal format. The full references should be listed in numerical order of citation in the text at the end of the paper (justified), Times New Roman, 9 pt, 1 spacing. References should be given in the following form:

Journals

1. Holzwarth G., Eckart G. Fluid-dynamical approximation for finite Fermi systems // Nucl. Phys. - 1979. - Vol. A325. - P.1-30.

Books

2. Bertsch G.F., Broglia R.A. Oscillations in finite quantum systems. Ch. 6. - Cambridge: Cambridge University, 1994. - 150 p.

Chapters

3. Van der Woude A. The electric giant resonances // Electric and magnetic giant resonances in nuclei / Ed. by J. Speth. - Singapore: World Scientific P.C., 1991. - P. 99-232.

Conference or symposium proceedings

4. Smolanzuk R., Skalski J., Sobiczewski A. Masses and half-life of superheavy elements // Proc. of the International Workshop 24 on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations / Ed. by H. Feldmeier et al. - GSI, Darmstadt, 1996. - P.35-42.

Special Notes

1. Use International System of Units (SI system). 2. It is undesirable to use acronyms in the titles. Please define the acronym on its first use in the paper. 3. Refer to isotopes as ¹⁴C, ³H, ⁶⁰Co, etc.

Наукове видання

СХІДНО-ЄВРОПЕЙСЬКИЙ ФІЗИЧНИЙ ЖУРНАЛ

Том 2 Номер 2

EAST EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS

Volume 2 Number 2

Збірник наукових праць
англійською, українською, російською мовами

Коректор - Коваленко Т.О.
Технічний редактор - Гірник С.А.
Комп'ютерне верстання - Гірник С.А.

Підписано до друку 4.06.2014. Формат 60x84 /8. Папір офсетний. Друк
ризографічний.

Ум. друк. арк. 14,2. Обл.-вид. арк. 11,4.
Тираж 300 пр. Зам. № Ціна договірна

61022, Харків, майдан Свободи, 4
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Видавництво

Надруковано: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61022, Харків, майдан Свободи 4, тел. +380-057-705-24-32
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09