

ВЕСТНИК

НОВОСИБИРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Научный журнал

Основан в ноябре 1999 года

Серия: Физика

2007. Том 2, выпуск 4

СОДЕРЖАНИЕ

Теоретическая и математическая физика

- Козлов М. Г., Резниченко А. В., Фадин В. С.* Квантовая хромодинамика при высоких энергиях 3

Физика жидкости, нейтральных и ионизованных газов

- Довгаль А. В., Козлов В. В., Сорокин А. М.* Локальные и глобальные свойства неустойчивости течений с отрывом ламинарного потока 32
- Шевченко А. М., Шмаков А. С., Кавун И. Н., Запрягаев В. И.* Гиперзвуковое взаимодействие вихревого следа за крылом и телом вращения со скачком уплотнения на входе в модельный воздухозаборник 38
- Верецагин А. С., Фомин В. М.* Оценка скорости заполнения колонки с ценосферами гелием 45
- Горев В. Н., Катасонов М. М., Щербаков В. А.* Экспериментальное исследование возникновения и развития волновых пакетов-предвестников локализованных возмущений в двумерных и трехмерных пограничных слоях 49
- Андреев М. Н., Ребров А. К., Сафонов А. И., Тимошенко Н. И.* Исследование процессов осаждения тонких тефлоноподобных пленок газоструйным методом 55
- Зарвин А. Е., Корбейщиков Н. Г., Каляда В. В., Мадирбаев В. Ж.* Техника моделирования плазмохимических процессов методами импульсной газодинамики 63

Химическая, биологическая и медицинская физика

- Докторов А. Б., Кадетов А. А., Киприянов А. А.* Учет силовых корреляций в многочастичном выводе немарковских кинетических уравнений химических реакций 68
- Анищик С. В., Верховлюк В. Н., Молин Ю. Н.* Времяразрешенные эффекты микроволнового поля в рекомбинационной флуоресценции гексановых растворов 1,2-дифенилиндола 75
- Орлова Д. Ю., Юркин М. А., Семьянов К. А., Мальцев В. П.* Оптические свойства гранулярных клеток крови: нейтрофилы 83
- Киприянов-мл. А. А., Пуртов П. А.* Возможность сильного разогрева фотохимической системы под влиянием слабых магнитных полей 88
- Лаврик Н. Л., Немова Е. Ф.* Изучение действия терагерцового излучения лазера на свободных электронах на лиофилизированные образцы бычьего сывороточного альбумина методами ИК и УФ спектроскопии 96

Квантовая оптика, квантовая электроника

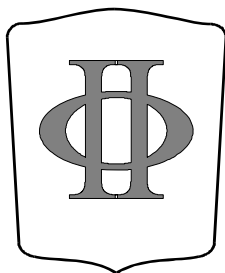
- Князев Б. А., Ан В. (An W.), Блюм Г. (Blum H.), Деулин Ю. А., Дорошкин А. А., Матвеев А. Н., Насыров К. А., Черкасский В. С.* Широкополосные мощные импульсные лазеры на красителях для каскадного возбуждения верхних состояний атома лития в сильном электрическом поле 102
- Ражев А. М., Чуркин Д. С., Тарасов Н. С.* Исследование параметров генерации индукционного лазера на молекулярном азоте 113

Физика высоких энергий, ускорителей и высокотемпературной плазмы

- Котельников И. А., Роме М., Поццолли Р.* Релятивистские эффекты в равновесии заряженной плазмы 118
- Аржанников А. В., Астрелин В. Т., Калинин П. В., Сеницкий С. Л., Степанов В. Д.* Одновременная генерация и транспортировка двух сильноточных ленточных пучков 125
- Мигинский С. В.* Когерентность колебаний пучка в поле собственного заряда и параметры электронных пушек 132

Физика твердого тела, полупроводников, наноструктур

- Боярский Л. А.* Псевдощелевые явления в сверхпроводниках, щель и псевдощель в системах с волнами спиновой / зарядовой плотности. Общий подход и применимость двухжидкостной модели 145
- Информация для авторов 152



Вестник НГУ. Серия: Физика

Журнал адресован профессорско-преподавательскому составу университетов, научным работникам, аспирантам и студентам, которые интересуются новейшими результатами фундаментальных и прикладных исследований по различным направлениям физики и физико-технической информатики.

Редакция принимает к опубликованию обзоры и оригинальные научные статьи по тем направлениям физики, которые, главным образом, представлены на кафедрах физического факультета НГУ. Принимаются также к рассмотрению статьи по другим направлениям, если в ходе рецензирования подтверждается их высокий научный статус.

Мы приглашаем научные коллективы и отдельных авторов направлять к нам для опубликования материалы по следующим основным разделам:

- квантовая оптика, квантовая электроника;
- радиофизика и электроника;
- теоретическая и математическая физика;
- физика жидкости, нейтральных и ионизованных газов;
- физика высоких энергий, ускорителей и высокотемпературной плазмы;
- физика твердого тела, полупроводников, наноструктур;
- физика химическая, биологическая и медицинская;
- информатика, информационно-коммуникационные технологии;
- учебно-методическое обеспечение преподавания физики.

Периодичность выхода издания – 4 раза в год. Журнал включен в перечень ВАК выпускаемых в Российской Федерации научных и научно-технических изданий, в которых рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук.

М. Г. Козлов¹, А. В. Резниченко², В. С. Фадин³Институт ядерной физики СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 11, Новосибирск, 630090, РоссияНовосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, РоссияE-mail: ¹ M.G.Kozlov@inp.nsk.su;² A.V.Reznichenko@inp.nsk.su;³ Fadin@inp.nsk.su**КВАНТОВАЯ ХРОМОДИНАМИКА ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ ***

Дан краткий и по возможности упрощенный обзор методов и результатов суммирования рядов теории возмущений для процессов при больших энергиях и ограниченных передачах импульса в современной теории сильных взаимодействий – квантовой хромодинамике. Особое внимание уделено подходу BFKL и сравнению его с моделью цветowych диполей.

Ключевые слова: уравнение BFKL, дипольная картина, уравнение ВК, эффективное действие.

Введение

Квантовая хромодинамика (КХД) считается общепризнанной теорией сильных взаимодействий, хотя ни кинематические свойства экспериментально наблюдаемых сильно-взаимодействующих частиц-адронов, ни их взаимодействие на характерных адронных расстояниях $r_h \sim 0,2 fm$ (порядка размера нуклона) в рамках КХД описать по существу не удастся. В основном успехи КХД связаны с малыми (много меньшими r_h) расстояниями и обусловлены ее фундаментальным свойством – асимптотической свободой, т. е. стремлением эффективного заряда к нулю на малых расстояниях.

По современным представлениям адроны – это сложные образования, состоящие из кварков (подразумеваются и антикварки) и глюонов. Кварки и глюоны считаются элементарными частицами; именно они и являются объектами теории. Многообразие наблюдаемых адронов связано с наличием нескольких типов кварков, называемых ароматами или флэйворами. В настоящее время известно шесть ароматов. Но для КХД они отличаются только массой; в лагранжиан КХД кварки разных ароматов входят аддитивно, так что ароматы не связаны с динамикой. Взаимодействие кварков обусловлено в КХД наличием у них «цвета». Дополнительное (по отношению к аромату)

квантовое число было введено в 1965 г. [1; 2; 3; 4], еще до возникновения КХД, для того чтобы согласовать симметрию флэйворной, спиновой и координатной волновой функции барионов с требованием статистики Ферми – Дирака. Впоследствии [5] это число получило название «цвет». Для обеспечения антисимметрии полной волновой функции нужно три различных «цвета» (обычно называют красный, голубой и желтый). Сильными аргументами в пользу существования трех цветов стали результаты экспериментов по измерению сечения e^+e^- аннигиляции в адроны в области энергий в районе 2 ГэВ и сравнение ширины распада $\Gamma(\pi^0 \rightarrow 2\gamma)$ с теорией, основанной на аномалии в дивергенции аксиально-векторного тока [6; 7]. В теоретические предсказания для этих величин число цветов входит множителем. Для совпадения предсказаний теории с экспериментом этот множитель должен быть равен трем.

Все цвета равноправны, что означает инвариантность лагранжиана КХД относительно унитарных преобразований в цветовом пространстве. Эти преобразования образуют группу $SU(3_c)$ (индекс внизу обозначает цвет). При этом все наблюдаемые адроны являются «бесцветными или цветовыми синглетами», т. е. их цветовые волновые функции не меняются при преобра-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и INTAS.

зованиях группы $SU(3_c)$. Отсутствие «цветных» физических состояний (по-другому, невылетание цвета, или конфайнмент) получило объяснение (по крайней мере качественное) только в рамках КХД.

КХД — это локальная калибровочная теория поля, описывающая взаимодействие кварков и глюонов. Известным примером калибровочной теории является релятивистская квантовая теория взаимодействия электронов и фотонов — квантовая электродинамика (КЭД). По построению КХД во многом похожа на КЭД, с тем существенным отличием, что группа калибровочных преобразований $SU(3_c)$, лежащая в основе КХД, является неабелевой, в отличие от абелевой группы преобразований КЭД. Поэтому вместо одного фотона число переносчиков взаимодействия — глюонов — в КХД равно восьми (по числу параметров группы), и они не являются бесцветными (обладают цветовым зарядом). В результате зависимость эффективного цветового заряда g (константы связи в КХД) от расстояния кардинально отличается от КЭД, где эффективный заряд убывает с увеличением расстояния в результате его экранировки парами виртуальных заряженных частиц. Вместо этого в КХД эффективный заряд растет с увеличением расстояния, т. е. имеет место антиэкранировка. С уменьшением же расстояния заряд стремится к нулю, что и означает асимптотическую свободу. Это замечательное явление было открыто в работах Гросса, Вильчека [8] и Политцера [9]. Решающую роль в нем играет самодействие глюонов, обеспечивающее антиэкранировку цветового заряда. Для цветовой группы $SU(N_c)$ и n_f кварковых ароматов зависимость эффективного заряда от расстояния r имеет вид

$$\alpha_s(r) \equiv \frac{g^2(r)}{4\pi} \simeq \frac{2\pi}{b \ln(1/r\Lambda_{QCD})},$$

$$b = \frac{11}{3}N_c - \frac{2}{3}n_f > 0, \quad (1)$$

где величина $\Lambda_{QCD} \sim 300$ МэВ характеризует адронный масштаб. Конечно, формула (1) применима только в области, где эффективный заряд $\alpha_s(r)$ мал, т. е. при $r \ll 1/\Lambda_{QCD}$.

Асимптотическая свобода обеспечивает возможность использования теории возму-

щений в области больших передач импульса Q , поскольку существенные расстояния $r \sim 1/Q$. Поэтому особый интерес для детального теоретического исследования представляют так называемые жесткие процессы, для которых $Q^2 \gg \Lambda_{QCD}^2$. В таких процессах важна стадия развития, происходящая на малых расстояниях $r \sim 1/Q$ (жесткая стадия). На этой стадии рассмотрение ведется в терминах кварковых и глюонных полей, т. е. непосредственно с помощью лагранжиана КХД и построенной на его основе теории возмущений. Применимость теории возмущений обеспечивается малостью эффективного заряда на этой стадии.

Асимптотическая свобода позволила объяснить обнаруженное в 1963 г. в экспериментах по глубоко-неупругому электрон-протонному рассеянию на Стенфордском линейном ускорителе (SLAC) удивительное для того времени явление, получившее название бёркеновский скейлинг. Было обнаружено, что для виртуального фотона с энергией ω в системе покоя протона и виртуальностью («массой») $-Q^2$ его полное сечение взаимодействия с протоном, умноженное на Q^2 , является функцией только отношения $x = Q^2/(2M\omega)$, где M — масса протона. Для естественного объяснения этого явления требовалось предположить [10], что составляющие протона (партоны) почти не взаимодействуют на малых расстояниях. В экспериментах по глубоко-неупругому $e-p$ рассеянию было обнаружено также, что отношение сечений для продольно и поперечно поляризованных фотонов близко к нулю (соотношение Калана — Гросса), что свидетельствовало о том, что заряженные партоны имеют спин $1/2$. Успешное теоретическое описание процесса глубоко-неупругого рассеяния положило начало триумфальному становлению КХД как теории сильных взаимодействий.

Однако во всех сильных взаимодействиях всегда присутствует мягкая стадия, на которой происходит формирование адронов. Для этой стадии характерные расстояния $r \sim r_h \sim 1/\Lambda_{QCD}$, так что здесь $\alpha_s \sim 1$, и она не может быть описана в рамках теории возмущений (является существенно непертурбативной). Рассмотрение этой стадии осложнено еще и нетривиальностью вакуума теории [11; 12].

Поэтому в рамках КХД «из первых принципов» возможно вычисление только полностью инклюзивных величин (таких, как полное сечение однофотонной e^+e^- аннигиляции в адроны), где детали процесса адронизации не важны (полная вероятность перехода партонов в адроны равна 1). Описание же процессов с характерной виртуальностью Q^2 на жесткой стадии, с адронами в начальном состоянии и с выделенными адронами в конечном состоянии проводится с помощью функций распределения $f_h^i(x, Q^2)$ партонов (кварков и глюонов) типа i в адроне h и функций фрагментации $\bar{f}_i^h(x, Q^2)$ партона типа i в адроны h . Функции распределения (фрагментации) имеют простой физический смысл в системе, где адрон h (партон i) является ультрарелятивистским, или в пределе, модуль его импульса $p = |\vec{p}|$ стремится к бесконечности. Такую систему называют системой бесконечного импульса; при этом импульсы вдоль $\vec{p}$ называют продольными, а перпендикулярные к $\vec{p}$ – поперечными. В системе бесконечного импульса $f_h^i(x, Q^2)dx$ есть число партонов с продольным импульсом от xp до $(x+dx)p$ и поперечными импульсами меньше Q (или с поперечными размерами больше $1/Q$). Аналогично $\bar{f}_i^h(x, Q^2)dx$ есть число адронов h с продольным импульсом от xp до $(x+dx)p$ и поперечными импульсами меньше Q (или поперечными размерами больше $1/Q$). Физические наблюдаемые выражаются через партонные функции распределения $f_h^i(x, Q^2)$, сечения $d\sigma_p(s_p, Q^2)$ взаимодействия партонов (s_p – квадрат полной энергии партонов) и функций фрагментации $\bar{f}_i^h(x, Q^2)$. Наиболее прост уже обсуждавшийся случай глубоко-неупругого рассеяния. Здесь сечение выражается через функции распределения заряженных партонов в адроне. Если обозначить k и k' импульсы электрона в начальном и конечном состояниях, p – импульс адрона, $q = k - k'$, и ввести переменные

$$x = \frac{Q^2}{2pq}, \quad y = \frac{pq}{pk} = \frac{Q^2}{2xpk}, \quad Q^2 = -q^2,$$

то

$$\frac{d\sigma}{dxdy} = \frac{2\pi\alpha^2}{x^2 y^2 (pk)} \times \left[(1-y) F_2(x, Q^2) + \frac{y^2}{2} 2xF_1(x, Q^2) \right],$$

причем

$$F_2(x, Q^2) = \sum_i Q_i^2 x f_h^i(x, Q^2),$$

где Q_i – заряд партона i , а соотношение Калана – Гросса есть $2xF_1 = F_2$. В отличие от партонных сечений $d\sigma_p(s_p, Q^2)$, полностью вычислимых в теории возмущений, функции распределения и фрагментации содержат информацию о мягкой стадии процесса и поэтому не могут быть найдены по теории возмущений. Однако уравнения для изменения этих функций с Q (уравнения эволюции) выводятся в теории возмущений, поскольку вид этих уравнений определяется только виртуальностями порядка Q^2 . Они называются уравнениями Докшицера – Грибова – Липатова – Алтарелли – Паризи (DGLAP) [13–15] и имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial \ln Q^2} f_h^i(x, Q^2) = \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi} \int_x^1 \frac{dz}{z} P_i^j \left(\frac{x}{z} \right) f_h^j(z, Q^2).$$

Ядра уравнений эволюции (функции расщепления) P_i^j определяют скорость изменения вероятности распределения партонов типа i за счет испускания партонов типа j с изменением Q^2 . Они представляются рядами по степеням $\alpha_s(Q^2)$. Ведущие (нулевые) члены рядов можно легко вычислить, пользуясь методом эквивалентных фотонов и электронов [16] и его обобщением на глюоны. Начальные условия для уравнений эволюции, т. е. значение партонных плотностей в исходной точке Q_0^2 порядка адронного масштаба, не могут быть найдены теоретически и должны извлекаться из эксперимента. Партонные функции распределения являются универсальными, т. е. не зависят от процесса.

Уравнения DGLAP позволяют суммировать члены, усиленные в каждом порядке теории возмущений степенями «больших логарифмов» $\ln Q^2$. Эти логарифмы называют коллинеарными, так как они набираются от области малых углов между импульсами партонов. Наряду с этими

логарифмами как в партонных функциях распределения и фрагментации при малых x , так и в партонных сечениях при малых значениях отношения Q^2/s_p (в дальнейшем для простоты будем называть это отношение тоже x) имеются логарифмы $\ln(1/x)$ (они называются «мягкими»), которые набираются от интегрирования по относительным энергиям, или быстрой части партонов. В области малых x эти логарифмы оказываются даже важнее, чем $\ln Q^2$, и возникает задача их суммирования.

Подход BFKL

Наиболее общую основу для теоретического описания процессов с малыми x дает подход BFKL (Балицкого – Фадина – Кураева – Липатова) [17–19], основанный на замечательном свойстве КХД – реджезации глюона.

Реджезацией элементарной частицы со спином j и массой m называется замечательное (и не до конца понятое) явление в квантовой теории поля, состоящее в том, что при больших энергиях $\sqrt{s}$ сталкивающихся частиц и фиксированных переданных импульсах $\sqrt{-t}$ амплитуды процессов с обменом этой частицей с учетом радиационных поправок имеют тот же вид, что и в борновском приближении, но со спином, отличным от j и зависящим от передачи импульса. Впервые это явление было обнаружено в 1964 г. М. Гелл-Манном, М. Л. Голдбергером, Ф. Е. Лоу, Е. Марксом и Ф. Закарайзенем [20] в квантовой электродинамике в процессе комптоновского рассеяния назад (точнее, на углы, близкие к π). Оно было названо реджезацией, потому что как раз к такому виду амплитуд приводит наличие полюса в комплексной плоскости угловых моментов J , положение которого $j(t)$ зависит от передачи импульса t и который при $t = m^2$ (т. е. в перекрестном канале) находится в точке j . Комплексные угловые моменты были введены в квантовой механике итальянским физиком Редже, движущиеся с t полюса стали называться Реджевскими полюсами, а зависимость $j(t)$ – траекторией Редже. Теория комплексных угловых моментов была развита В. Н. Грибовым для релятивистских частиц и сыграла выдающуюся роль в физике эле-

ментарных частиц. В 1960-х – начале 1970-х гг. эта теория была основным и почти единственным инструментом теоретического анализа сильных взаимодействий. Из нее выросли модель Венециано и алгебра Вирасоро, струны и суперструны. Реджезация элементарных частиц создает мостик между квантовой теорией поля и теорией комплексных моментов и, по-видимому, указывает на связь реджезующихся частиц со струнами.

Положение $j(0)$ реджевского полюса при $t = 0$ принято называть интерсептом, а производную $j'(0)$ – наклоном траектории. В теории Грибова фундаментальную роль играет реджеон с вакуумными квантовыми числами, положительной сигнатурой (четностью относительно замены $s \rightarrow -s$) и интерсептом, равным (или большим) 1, названный помероном в честь выдающегося советского физика И. Я. Померанчука. Этот реджеон определяет поведение полных сечений при больших энергиях. Первоначально он был введен (с интерсептом 1) [21; 22] для обеспечения постоянных полных сечений при асимптотически больших энергиях. Большой интерес вызывает и другой реджеон, отличающийся от померона C - и P -четностью и названный оддероном [23; 24]. Он отвечает за разность сечений рассеяния частицы и античастицы на какой-либо мишени.

Замечательным свойством КХД является то, что в ней реджезуются не только кварки, но и глюоны (в отличие от КЭД, где реджезуется только электрон, фотон же остается элементарным), что чрезвычайно важно для теоретического описания процессов при больших энергиях и фиксированных передачах импульса. В настоящее время реджезация глюона доказана в КХД как в главном логарифмическом приближении (ГЛП), когда суммируются только члены $(\alpha_s \ln s)^n$ ряда теории возмущений, так и в следующем за ним (СГЛП), когда суммируются и члены $\alpha_s (\alpha_s \ln s)^n$.

Идея реджезации глюона возникла в результате вычислений амплитуд неабелевых калибровочных теорий в нескольких первых порядках теории возмущений. Чрезвычайно удобным для анализа этих амплитуд оказался дисперсионный метод вычислений, основанный на унитарности и аналитичности.

Продemonстрируем *дисперсионный метод* на примере вычисления амплитуд в борнов-

ском приближении. В этом приближении амплитуды вычисляются с помощью t -канальной унитарности [25]. Нас интересуют главные ($\sim s$) вклады в амплитуды, приводящие к сечениям, не падающим с энергией. Такие вклады дает только обмен глюоном в t -канале. Это легко понять, рассматривая амплитуду с точки зрения t -канального парциального разложения. Обмен частицей со спином j дает вклад в него, пропорциональный $P_j(\cos\theta_t)$, где P_j – полином Лежандра, а θ_t – угол рассеяния в t -канале, $\theta_t \approx 1 - 2s/t$ (для простоты мы берем рассеяние скалярных частиц с нулевой массой; учет массы и спина не меняет результата). При переходе в s -канал имеем в реджевской области (большие энергии и ограниченные передачи импульса) $P_j(\cos\theta_t) \propto (s/t)^j$. Таким образом, t -канальные скачки упругих амплитуд $A_{AB}^{A'B'}(s, t)$ представляются диаграммами (рис. 1). Вьющаяся линия изображает t -канальный глюон; пересечение этой линии пунктирной означает вычисление скачка, т. е. замену

$$\frac{1}{t+i0} \rightarrow -2\pi i \delta(t)$$

в его пропагаторе; прямые же линии могут представлять как кварки, так и глюоны. В реджевской области главные по s члены можно получить с помощью следующей замены числителя $g^{\mu\nu}$ глюонного пропагатора, соединяющего вершину с импульсами p_A, p_A' и индексом μ с вершиной с импульсами p_B, p_B' и индексом ν :

$$g^{\mu\nu} \rightarrow \frac{2p_B^\mu p_A^\nu}{s},$$

так что

$$2i\Im_t A_{AB}^{A'B'}(s, t) = -4\pi i s \delta(t) \Gamma_{AA'}^c \Gamma_{BB'}^c,$$

где $\Im_t$ обозначает t -канальную мнимую часть ($2i\Im_t \equiv \text{disc}_t$ – скачок в t -канале). Перенормируемость теории требует падения членов $\sim s$ с t , поэтому t -канальная мнимая часть однозначно определяет амплитуду:

$$A_{AB}^{A'B'}(s, t) = \frac{2s}{t+i0} \Gamma_{AA'}^c \Gamma_{BB'}^c, \quad (2)$$

где $\Gamma_{P'P}^c$ – эффективные вершины (как станет ясно из дальнейшего, это вершины

взаимодействия реджезованного глюона с частицами P, P' ; для краткости мы будем называть их также вершинами рассеяния). В спиральном базисе

$$\Gamma_{P'P}^c = g T_{P'P}^c \delta_{\lambda_P \lambda_{P'}}, \quad (3)$$

где $T_{P'P}^c$ – генераторы цветовой группы в соответствующем представлении; λ – спиральности частиц. Подчеркнем, что вершины $\Gamma_{P'P}^c$ – отнюдь не вершины фейнмановских диаграмм, и что амплитуда (2) представляет совокупность вкладов нескольких фейнмановских диаграмм. Ее можно рассматривать как борновское приближение для амплитуды с обменом реджеоном – реджезованным глюоном (рис. 2). В этом приближении пропагатор реджеона есть просто $1/t$.

При дисперсионном подходе невозможно ограничиться вычислением только упругих амплитуд; с ростом порядка теории возмущений требуется знание все большего числа неупругих амплитуд. На первый взгляд задача представляется невообразимо сложной.

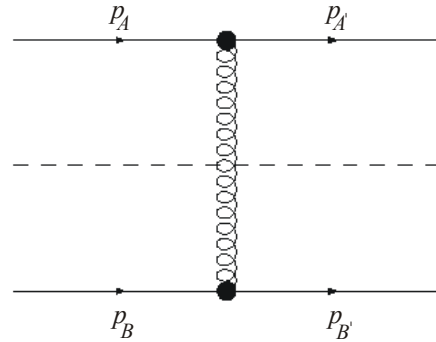


Рис. 1. t -канальный скачок амплитуды $A_{AB}^{A'B'}(s, t)$

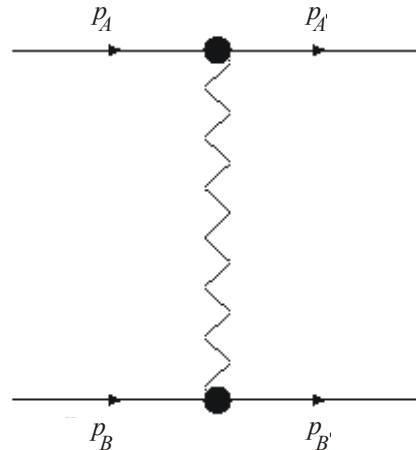


Рис. 2. Амплитуда $A_{AB}^{A'B'}(s, t)$ с реджеоном в t -канале

Оказывается, однако, что она чрезвычайно упрощается благодаря двум обстоятельствам.

Во-первых, неупругие амплитуды нужны только в специальной кинематике, которая называется мультиреджевской. В ней частицы имеют ограниченные (не растущие с энергией) поперечные импульсы, а по продольным импульсам они разбиваются на группы (струи) с близкими (одного порядка) импульсами; при этом продольные импульсы струй сильно разнятся при переходе от одной к другой (другими словами, струи сильно упорядочены по быстройтам). То, что такая кинематика играет важнейшую роль в сильных взаимодействиях, было осознано К. А. Тер-Мартirosяном еще в 1965 г. [26], задолго до появления КХД. При вычислениях дисперсионным методом большие логарифмы $\ln s$ возникают при интегрировании по продольным импульсам промежуточных струй в соотношении унитарности. Поэтому в ГЛП каждая струя есть фактически одна частица; в СГЛП в одной из струй может быть две частицы.

Во-вторых, оказывается, что реджезация глюона обеспечивает простую факторизованную форму амплитуд процессов множественного рождения частиц в МРК. Они выражаются через эффективные вершины взаимодействия реджезованного глюона с частицами и реджевскую траекторию глюона, причем вся энергетическая зависимость определяется траекторией.

В ГЛП полный набор реджеонных вершин состоит из вершин рассеяния (3) и вершины рождения глюона, которая появляется при вычислении амплитуд $2 \rightarrow 3$. Амплитуды $A_{AB}^{A'DB'}$ вычисляются по t_1 - и t_2 -канальным скачкам (рис. 3); $t_i = q_i^2$, $q_1 = p_A - p_{A'}$, $q_2 = p_{B'} - p_B$.

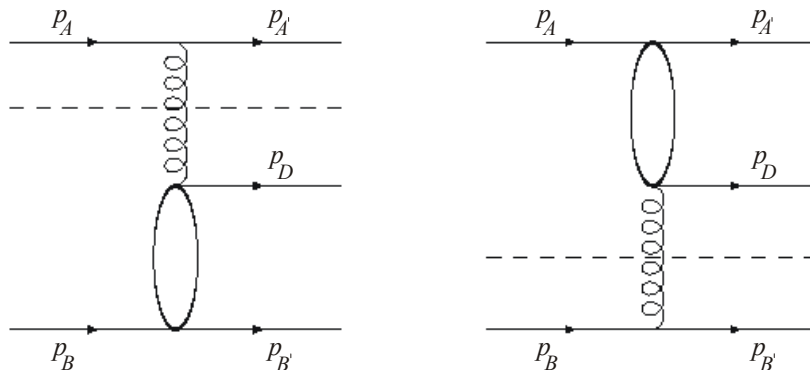


Рис. 3. Схематическое представление t_1 - и t_2 -канальных скачков амплитуды $A_{AB}^{A'DB'}$

В ГЛП рождаться может только глюон. Скачки в каналах t_1 и t_2 однозначно определяют амплитуду:

$$A_{AB}^{A'DB'} = 2s \Gamma_{A'A}^{c_1} \frac{1}{t_1} \gamma_{c_1 c_2}^d(q_1, q_2) \frac{1}{t_2} \Gamma_{B'B}^{c_2}, \quad (4)$$

где $\Gamma_{P'P}^c$ — вершины рассеяния, а

$$\gamma_{c_1 c_2}^d(q_1, q_2) = g T_{c_1 c_2}^d e_\mu^*(k) C^\mu(q_2, q_1),$$

$$C^\mu(q_2, q_1) = -q_1^\mu - q_2^\mu + p_A^\mu \left(\frac{q_1^2}{k p_A} + 2 \frac{k p_B}{p_A p_B} \right) - p_B^\mu \left(\frac{q_2^2}{k p_B} + 2 \frac{k p_A}{p_A p_B} \right)$$

есть вершина рождения глюона с импульсом k , вектором поляризации $e(k)$ и цветовым индексом d . Отметим ее нелокальность, проявляющуюся в наличии зависящих от импульсов знаменателей. Подчеркнем опять, что это отнюдь не трехглюонная вершина фейнмановских диаграмм, и что амплитуда (4) представляет совокупность множества фейнмановских диаграмм. Ее можно рассматривать как борновское приближение для амплитуды с реджезованными глюонами в каналах t_1 и t_2 (рис. 4).

Радиационные поправки вычисляются с помощью s -канальной унитарности. Для упругой амплитуды скачки с двумя и тремя частицами в s -канале представлены на рис. 5.

Траектория глюона появляется уже при вычислении первой радиационной поправки к упругой амплитуде. Для ее вычисления нужен только двухчастичный скачок. В следующем порядке в двухчастичном скачке (см. рис. 5) одна из упругих амплитуд должна браться уже с учетом первой по-

правки. Результат вычисления согласуется с реджевской формой

$$A_{AB}^{A'B'} = \Gamma_{A'A}^c \left[\left(\frac{-s}{-t} \right)^{j(t)} - \left(\frac{s}{-t} \right)^{j(t)} \right] \Gamma_{B'B}^c,$$

где $j(t) = 1 + \omega(t)$ – реджевская траектория глюона,

$$\begin{aligned} \omega(t) &\equiv \omega(\vec{q}) = \frac{g^2 N_c t}{2(2\pi)^{D-1}} \int \frac{d^{D-2} q_1}{\vec{q}_1^2 (\vec{q} - \vec{q}_1)^2} = \\ &= -g^2 \frac{N_c \Gamma(1-\varepsilon)}{(4\pi)^{D/2}} \frac{\Gamma^2(\varepsilon)}{\Gamma(2\varepsilon)} (\vec{q}^2)^\varepsilon. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $D = 4 + 2\varepsilon$ – размерность пространства-времени, взятая отличающейся от 4 для регуляризации инфракрасных расходимостей. Заметим, что расходимость в траектории при $\varepsilon \rightarrow 0$ аналогична инфракрасной расходимости упругих амплитуд в КЭД. В наблюдаемых физических величинах эти расходимости сокращаются. В (5) $\vec{q}$ и $\vec{q}_1$ – $D-2$ -мерные векторы, ортогональные векторам p_A, p_B ; $t = -\vec{q}^2$.

Для трехпетлевого вычисления упругих амплитуд требуется знание амплитуд $2 \rightarrow 3$ с учетом первой поправки и $2 \rightarrow 4$ в борновском приближении. Проведенные вычисления подтвердили реджевскую форму упругих амплитуд и позволили сформулировать *гипотезу реджезации* для неупругих амплитуд.

Согласно этой гипотезе, амплитуды рождения струй частиц в МРК (рис. 6) имеют вид

$$\begin{aligned} \mathcal{R}A_{AB}^{J_0 J_1 \dots J_{n+1}} &= 2s \Gamma_{J_0 A}^{c_1} \left(\prod_{i=1}^n \gamma_{c_i c_{i+1}}^{J_i} (q_i, q_{i+1}) \left(\frac{s_i}{s_0} \right)^{\omega(t_i)} \frac{1}{t_i} \right) \times \\ &\times \frac{1}{t_{n+1}} \left(\frac{s_{n+1}}{s_0} \right)^{\omega(t_{n+1})} \Gamma_{J_{n+1} B}^{c_{n+1}}, \end{aligned} \quad (6)$$

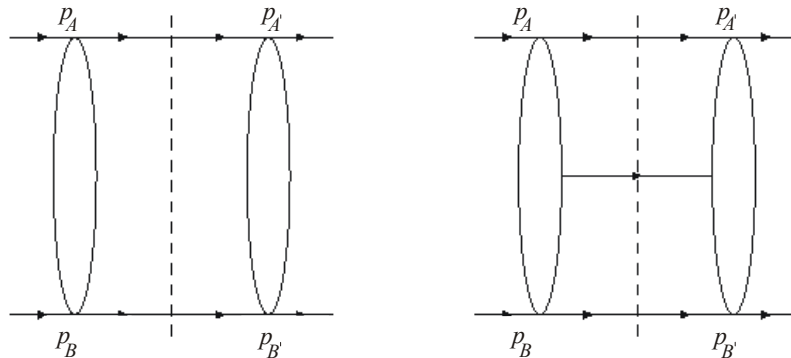


Рис. 5. Схематическое изображение двух- и трехчастичных s -канальных скачков упругих амплитуд

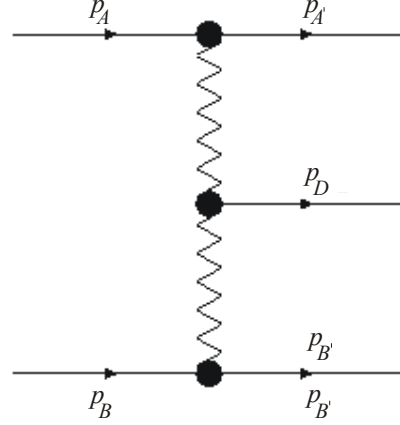


Рис. 4. Амплитуда $A_{AB}^{A'DB'}$ с реджеонами в t_1 - и t_2 -каналах

где $t_i = q_i^2$, $s_i = (p_{J_{i-1}} + p_{J_i})^2$, величина s_0 определяет масштаб энергии. В ГЛП она не играет роли; в СГЛП ее выбор зависит от определения реджеонных вершин; изменение s_0 компенсируется соответствующим изменением вершин. Все реджеонные вершины (см. [27]) и глюонная траектория [28–34] известны в настоящее время в СГЛП. Гипотеза реджезации глюона представляет собой чрезвычайно сильное утверждение: бесконечный набор многочастичных амплитуд выражается через конечное число реджеонных вершин и реджевскую траекторию глюона. К настоящему времени гипотеза реджезации глюона доказана как в ГЛП [35], так и в СГЛП [36]. Доказательство основано на так называемых соотношениях бутстрапа, выражающих условия совместности реджевской формы амплитуды с s -канальной унитарностью. Соотношения бутстрапа должны выполняться для амплитуд рождения любого числа струй, так что число их бесконечно. Оказывается, однако, что

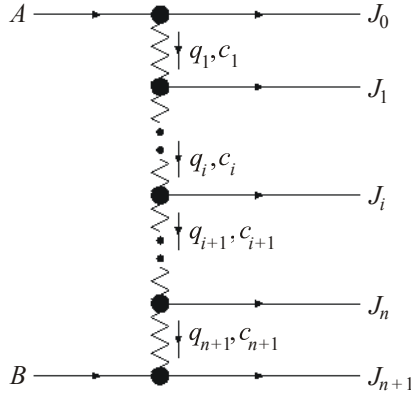


Рис. 6. Схематическое изображение амплитуд $A + B \rightarrow J_0 + J_1 + \dots + J_n + J_{n+1}$ в МРК

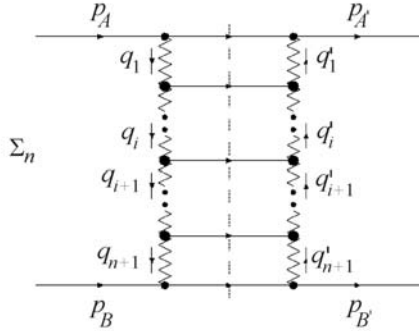


Рис. 7. Схематическое изображение s -канального скачка упрругих амплитуд $A_{AB}^{A'B'}$

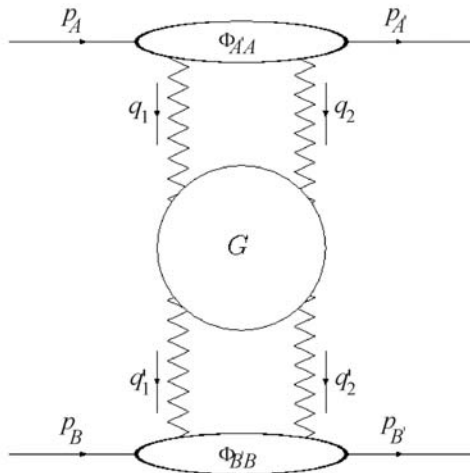


Рис. 8. Схематическое изображение амплитуды упругого рассеяния $AB \rightarrow A'B'$: G – функция Грина, Φ_{AA} и Φ_{BB} – импакт-факторы в импульсном представлении; q_i и q'_i – импульсы сталкивающихся реджеонов в t -канале

все они могут быть удовлетворены, если только выполнено несколько условий бутстрапа, представляющих собой жесткие ограничения на эффективные реджевские вершины и траекторию. К настоящему времени все эти условия проверены, и их выполнение доказано.

Уравнение BFKL. Гипотеза реджезации определяет амплитуды процессов с глюонными квантовыми числами в t -канале. Амплитуды процессов с другими квантовыми числами вычисляются с помощью соотношения унитарности и аналитичности. Для упрругих амплитуд $A_{AB}^{A'B'}$ со всеми возможными квантовыми числами и любой передачей импульса t соотношение унитарности позволяет выразить их s -канальные скачки через сумму произведений амплитуд (6), представленную на рис. 7.

Эти скачки однозначно определяют амплитуды $A_{AB}^{A'B'}$, которые представляются в виде свертки (рис. 8)

$$\Phi_{AA} \otimes G \otimes \Phi_{BB},$$

где импакт-факторы Φ_{AA} и Φ_{BB} описывают переходы $A \rightarrow A'$ и $B \rightarrow B'$, а G – функция Грина двух реджезованных глюонов. Вся зависимость от свойств взаимодействующих частиц заключена в импакт-факторах, а вся энергетическая зависимость в функции Грина.

В операторной форме s -канальные скачки амплитуд представляются в виде

$$\begin{aligned} \delta(\vec{q}_A - \vec{q}_B) \text{disc}_s A_{AB}^{A'B'} = \\ = \frac{i}{4(2\pi)^{D-2}} \langle A' \bar{A} | e^{Y \hat{K}} \frac{1}{\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2} | \bar{B}' B \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

где $q_A = p_{A'} - p_A$, $q_B = p_{B'} - p_B$, $\langle A' \bar{A} |$ и $| \bar{B}' B \rangle$ – t -канальные состояния, отвечающие импакт-факторам, $Y = \ln(s/s_0)$, s_0 – масштаб энергии, а $\hat{K}$ – ядро уравнения BFKL. При этом

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_1, \vec{q}_2 | \bar{B}' B \rangle &= \\ &= 4 p_B^- \delta(\vec{q}_B - \vec{q}_1 - \vec{q}_2) \Phi_{BB}(\vec{q}_1, \vec{q}_2), \\ \langle A' \bar{A} | \vec{q}_1, \vec{q}_2 \rangle &= \\ &= 4 p_A^+ \delta(\vec{q}_A - \vec{q}_1 - \vec{q}_2) \Phi_{AA}(\vec{q}_1, \vec{q}_2), \end{aligned}$$

где импакт-факторы Φ выражаются через реджеонные вершины согласно работе [37].

Здесь и в дальнейшем индексы $\pm$ используются для обозначения так называемых световых конусных компонент: $p^\pm = (p_0 \pm p_z)/\sqrt{2}$.

Уравнение BFKL имеет вид

$$\frac{d}{dY} \hat{G} = \hat{K} \hat{G}. \quad (8)$$

Ядро $\hat{K}$ представляется в виде суммы так называемых «виртуальной» и «реальной» частей:

$$\hat{K} = \hat{\Omega} + \hat{K}_r. \quad (9)$$

«Виртуальная» часть универсальна, т. е. не зависит от представления R цветовой группы в t -канале и выражается через траектории двух реджезованных глюонов в t -канале,

$$\hat{\Omega} = \hat{\omega}_1 + \hat{\omega}_2, \quad (10)$$

причем в импульсном представлении

$$\langle \vec{q}_i | \hat{\omega}_i | \vec{q}_i' \rangle = \delta(\vec{q}_i - \vec{q}_i') \omega(\vec{q}_i), \quad (11)$$

$\omega(\vec{q})$ – глюонная траектория Редже, которая в ГЛП дается формулой (5). В СГЛП траектория была вычислена в работах [28–34]. «Реальная» часть $\hat{K}_r$ в импульсном представлении записывается в виде

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_1, \vec{q}_2 | \hat{K}_r | \vec{q}_1', \vec{q}_2' \rangle &= \delta(\vec{q} - \vec{q}') \frac{1}{\vec{q}_1^2 \vec{q}_2^2} \times \\ &\times K_r(\vec{q}_1, \vec{q}_1'; \vec{q}), \quad \vec{q} = \vec{q}_1 + \vec{q}_1' = \vec{q}_2 + \vec{q}_2', \end{aligned} \quad (12)$$

где $K_r(\vec{q}_1, \vec{q}_1'; \vec{q})$ выражается через свертки вершин рождения частиц при взаимодействии реджезованных глюонов согласно работе [37]. В ГЛП возможно только рождение глюона, «реальная» часть представлена на рис. 9. Для представления R цветовой группы в t -канале имеем

$$\begin{aligned} K_r^{(R)B}(\vec{q}_1, \vec{q}_2; \vec{q}) &= \frac{g^2 N_c c_R}{(2\pi)^{D-1}} \times \\ &\times \left(\frac{\vec{q}_1^2 \vec{q}_2'^2 + \vec{q}_2^2 \vec{q}_1'^2}{(\vec{q}_1 - \vec{q}_1')^2} - \vec{q}^2 \right), \end{aligned} \quad (13)$$

и вся зависимость от цветового представления дается коэффициентом c_R . Для феноменологических применений наибольшее значение имеет померонный канал, т. е. синглетное представление ($R=1$), для которого $c_1=1$. С точки зрения теории не менее

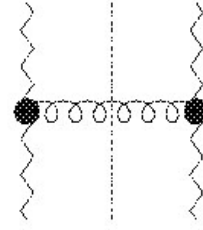


Рис. 9. Одноглюонный вклад в ядро BFKL

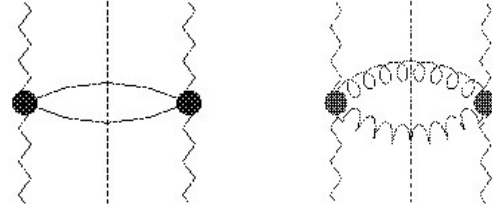


Рис. 10. Двухчастичный вклад в ядро BFKL

важен глюонный канал, т. е. антисимметричный октет ($R=8_a$), для которого $c_{8_a} = 1/2$.

В КХД первичным реджеоном является реджезованный глюон; померон, определяющий полное сечение рассеяния частицы на какой-либо мишени при высоких энергиях, и оддерон, отвечающий за разность сечений рассеяния частицы и античастицы, являются связанными состояниями двух и трех реджезованных глюонов соответственно.

В СГЛП одна из реджеонных вершин (см. рис. 9) должна быть взята в однопетлевом приближении [38–42]. Кроме рождения одного глюона возможно также рождение кварк-антикварковой пары и двух глюонов. Соответствующие вклады в ядро представлены на рис. 10.

Для рассеяния вперед (т. е. для синглетного представления и передачи импульса равной нулю) эти вклады были вычислены в работах [43; 44]. Ядро для рассеяния вперед играет особую роль, так как оно определяет асимптотику полного сечения. Полностью это ядро было найдено в СГЛП в работах [45; 46].

В главном логарифмическом приближении уравнение BFKL предсказывает степенной рост полных сечений с энергией

$$\sigma_t \propto s^{\omega_p}, \quad (14)$$

где

$$\omega_p^B = 4N_c \frac{\alpha_s}{\pi} \ln 2. \quad (15)$$

Величину ω_p обычно называют интерсептом BFKL померона (хотя правильнее было бы $1 + \omega_p$). Надо сказать, что уравнение приобрело широкую известность именно благодаря этому предсказанию, после того как рост сечений с энергией был обнаружен в экспериментах по глубоко-неупругому $e-p$ рассеянию на ускорительном комплексе HERA [47]. В связи с этим подход BFKL ассоциируется с уравнением для «непроеинтегрированных» функций распределения. Однако подход имеет неизмеримо большую общность. На уровне сечений он применим не только к полным сечениям, но и к эксклюзивным распределениям (неупругие амплитуды, образование струй и т. д.). Он дает также описание процессов не только на уровне сечений, но и на уровне амплитуд, причем как для бесцветных, так и для цветных состояний. Более того, динамика, описываемая этим подходом, наиболее ярко проявляется не в процессах типа глубоко-неупругого рассеяния, т. е. процессов с двумя разными масштабами виртуальностей, где она затемняется эволюцией партонных функций распределения по виртуальности, а в процессах с одним масштабом, таких как $\gamma^* - \gamma^*$ рассеяние с виртуальностями фотонов одного порядка, в которых эволюция DGLAP отсутствует.

Главное логарифмическое приближение может служить только для качественных предсказаний, так как в нем не фиксирован ни масштаб энергий, ни масштаб виртуальности для бегущей константы связи α_s . Как и в любой приближенной теории, только знание поправок к главному приближению позволяет понять область применимости теории и получить количественные предсказания. Поэтому вычисление поправок к ГЛП представлялось крайне важным.

Наибольший интерес вызвала поправка к ω_p , интерсепту BFKL померона (15). Как и все радиационные поправки, она зависит от схемы перенормировки и выбора масштаба виртуальности для α_s в главном приближении. Поправка к интерсепту, вычисленная в [45; 46] в $\overline{MS}$ схеме перенормировки при «естественном» выборе масштаба виртуальности, оказалась обескураживающе большой. Если записать

$$\omega_p = \omega_p^B \left(1 - r \frac{\alpha_s N_c}{\pi} \right),$$

то оказывается, что

$$r = 6,46 + 0,05 \frac{n_f}{N_c} + 0,96 \frac{n_f}{N_c^3},$$

где n_f — число кварковых ароматов; N_c — число цветов. Правда, если выразить поправку через интерсепт в ГЛП,

$$\omega_p = \omega_p^B (1 - \tilde{r} \omega_p^B),$$

то коэффициент $\tilde{r} \approx 2,4$ уже не так пугающе велик. Тем не менее возможность применения полученных результатов в кинематической области комплекса HERA казалась сомнительной.

В настоящее время развит ряд методов, позволяющих использовать результаты СГЛП для описания экспериментальных данных. В работах [48; 49] было показано, что использование неабелевских физических схем перенормировок и рецепта Бродского – Лепажа – Маккензи [50] для определения аргумента константы связи сильно уменьшает относительную величину радиационных поправок, и продемонстрировано, что полученные таким образом предсказания СГЛП находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными для полного сечения взаимодействия двух глубоко виртуальных фотонов $\sigma_{\gamma^* \gamma^*}$ с детекторов OPAL и L3 на коллайдере LEP2 в ЦЕРНе. В работах [51–53] было показано, что большие поправки связаны со вкладами, которые можно суммировать с помощью ренормгруппы, и был развит метод суммирования. Аналогичные идеи, только имеющие отправной точкой уравнения DGLAP, были развиты в работах [54–56].

В настоящее время ядро BFKL известно в СГЛП не только для рассеяния вперед, но и для произвольных передач импульса и для всех возможных представлений цветовой группы в t -канале [57–59], что значительно расширяет круг возможных применений. Кроме того, в области больших передач импульса снимается так называемая проблема диффузии в инфракрасную область. Суть проблемы состоит в следующем.

Для применимости теории возмущений нужна малость константы связи. Она может обеспечиваться, только если существенные (т. е. дающие основной вклад в амплитуду процесса) виртуальности (или поперечные импульсы) внутренних линий на диаграммах Фейнмана велики. Когда мы вычисляем

вклад в амплитуду диаграмм нижних порядков, виртуальности внутренних линий «привязаны» к виртуальностям или массам внешних линий, и большая величина первых обеспечивается соответствующей величиной вторых. Но с ростом энергии становятся более важными процессы с рождением все большего числа частиц (все большее число «перекладин» в «померонной лестнице»). Но чем дальше по энергии (или быстроте) находится рожденная частица от начальных частиц, тем меньше она чувствует их виртуальность. Область существенных поперечных импульсов $k_{\perp}$ расширяется (идет диффузия). При фиксированной константе связи она расширяется как в сторону больших $k_{\perp}$, так и в сторону малых. Уход в сторону малых $k_{\perp}$ означает нарушение применимости теории возмущений. Учет роста константы связи в области малых $k_{\perp}$ делает диффузию в область малых $k_{\perp}$ еще более быстрой.

При отличной от нуля передаче импульса t существенные $k_{\perp}$ могут уменьшаться только до $k_{\perp} \sim \sqrt{-t}$, так что проблема диффузии в инфракрасную область снимается при больших передачах уже в главном логарифмическом приближении. Что касается рассеяния вперед, то диффузия замедляется при учете суммированных с помощью ре-нормгруппы поправок [53].

Гораздо более очевидной, чем проблема диффузии, является так называемая проблема унитаризации. Степенной рост полных сечений с энергией (15) в асимптотике противоречит основанной на унитарности и аналитичности теореме Фруассара, согласно которой

$$\sigma_t(s) \leq \sigma_0 \ln^2 s.$$

Другими словами, BFKL померон нарушает унитарный предел. Конечно, в ограни-

ченной области энергий сечения могут расти с энергией степенным образом, что и наблюдается в эксперименте не только для $\gamma^* p$ взаимодействия, но и для адронных взаимодействий. Однако где-то степенной рост должен прекращаться. При этом ясно, что вычисление радиационных поправок любого конечного порядка к ГЛП не может прекратить этот рост. Для решения проблемы унитаризации требуются другие методы.

В принципе проблема унитаризации не нова. Она интенсивно обсуждалась в рамках реджеонной теории [60]. Существуют и различные методы ее решения, начиная от простейшего – суммирования много-померонных обменов (т. е., если представлять BFKL померон «лестницей» – рис. 11, *а*, то суммированием вкладов диаграмм с любым числом лестниц в t -канале) в эйкональном приближении. Более последовательное рассмотрение требует суммирования всех диаграмм с вершинами, представленными на рис. 11.

Определенные шаги в этом направлении сделаны: найдена трехпомеронная вершина (рис. 11, *б*) и изучены ее свойства [61; 62–64]. Однако не представляется очевидным, что этот путь приведет к правильному решению проблемы. Все-таки КХД – это теория взаимодействия цветных объектов. Как уже говорилось, первичным в КХД является реджезованный глюон, и именно с ним, а не с помероном, следует работать. На этом пути получено уравнение для состояний с несколькими реджезованными глюонами в t -канале [65; 66; 67] и доказана его интегрируемость в пределе большого числа цветов [68]. Наиболее общий подход к решению проблемы состоит в переформулировке КХД при высоких энергиях в терминах калибровочно-инвариантной эффективной теории поля для взаимодействия реджезованных глюонов [69].

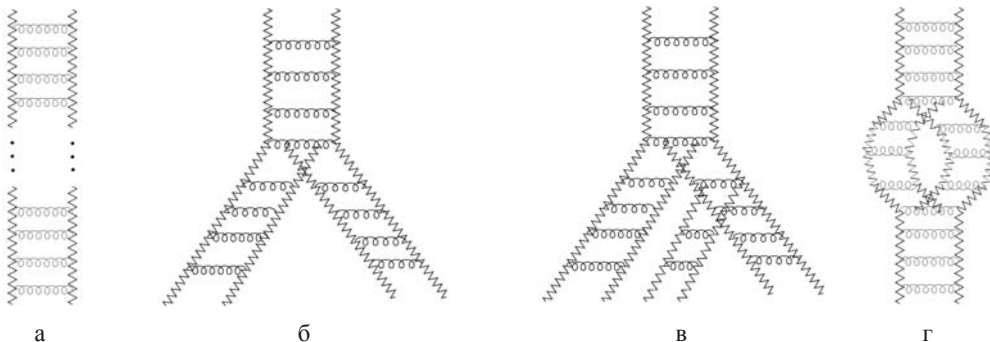


Рис. 11. BFKL померон: *а* – померонная лестница; *б* – трехпомеронная вершина; *в* – всерная диаграмма (расщепление померонных каскадов); *г* – померонная петля (слияние померонных каскадов)

Модель цветowych диполей

Другой подход к физике малых x основан на модели цветowych диполей Николаева – Захарова – Мюллера [70; 71]. В отличие от подхода BFKL он формулируется не в пространстве поперечных импульсов, а в пространстве прицельных параметров. Сечение глубоко неупругого рассеяния в этом подходе выражается через сечение взаимодействия цветowego диполя с мишенью, для которого пишется уравнение эволюции по x . Ядро этого уравнения мы будем называть дипольным ядром. В главном логарифмическом приближении это ядро совпадает со специальной формой ядра BFKL в координатном представлении. В отличие от BFKL в следующем приближении дипольное ядро до сих пор не найдено.

Дипольная картина Николаева – Захарова – Мюллера. Теоретическая интерпретация одной и той же физики может меняться при переходе в различные системы отсчета. Система бесконечного импульса адрона-мишени оказалась удобной для описания глубоко-неупругого рассеяния в терминах функций распределения партонов (кварков и глюонов) в адроне.

Виртуальный гамма-квант взаимодействует с кварками в адроне. Согласно уравнениям эволюции DGLAP, при малых x в адроне преобладают глюоны, так как в процессе расщепления любого партона вероятность их рождения $\propto dz/z$, где z – доля продольного импульса, уносимая глюоном. Поэтому кварк, с которым взаимодействует фотон, с подавляющей вероятностью является образованным одним из глюонов (такие кварки называются «морскими»), а не имеющимся в адроне на начальном этапе эволюции (их называют «валентными»). Оказывается удобным отделить процесс взаимодействия виртуального гамма-кванта с кварком от квантовой эволюции (являющейся BFKL эволюцией), включающей преимущественно излучение глюонов. Это может быть достигнуто путем перехода в систему, где виртуальный гамма-квант имеет большой импульс p_{γ^*} и энергию

$$q_0 = \sqrt{p_{\gamma^*}^2 - Q^2} \approx p_{\gamma^*} - Q^2/2p_{\gamma^*}. \text{ В этой системе}$$

гамма-квант рождает кварк-антикварковую пару $q\bar{q}$ в цветовой синглете, которая в дальнейшем и взаимодействует с адроном-мишенью. Рождение пары происходит на больших (много больших, чем

размер мишени) расстояниях до мишени. Действительно, по соотношению неопределенности, время жизни $q\bar{q}$ пары

$$\tau \sim \frac{1}{|q_0 - \varepsilon_q - \varepsilon_{\bar{q}}|} \approx \frac{2z(1-z)p_{\gamma^*}}{z(1-z)Q^2 + \vec{p}_{\perp}^2} \sim \frac{p_{\gamma^*}}{Q^2} \sim \frac{1}{x\varepsilon_h} \gg R_h,$$

где $\vec{p}_{\perp}$ – поперечная, а zp_{γ^*} – продольная компоненты импульса рожденного кварка; ε_h и $R_h \sim (1/M_h)(M_h/\varepsilon_h)$ – энергия и размер адрона в этой системе. Поэтому сечение взаимодействия виртуального гамма-кванта γ^* с мишенью представляется в факторизованной форме:

$$\sigma_{\gamma^*}(Y, Q^2) = \int d^2\rho \int_0^1 dz |\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{\rho})|^2 \sigma_{dp}(\rho, Y),$$

где $Y = \ln 1/x$, $\rho = |\vec{x}_{01}|$, $\vec{x}_{01} = \vec{x}_0 - \vec{x}_1$, $\vec{x}_0$ и $\vec{x}_1$ – поперечные координаты кварка и антикварка; $\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{\rho})$ – амплитуда вероятности найти в виртуальном фотоне в системе его бесконечного импульса «цветовой диполь» $q\bar{q}$; $\sigma_{dp}(\rho, Y)$ – полное сечение взаимодействия этого диполя с мишенью.

Амплитуда $\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{\rho})$ связана фурье-преобразованием

$$\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{\rho}) = \int \frac{d^2\vec{p}}{2\pi} e^{i\vec{p}\vec{\rho}} \Psi_{\gamma^*}(z, \vec{p}),$$

с амплитудой $\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{p})$ в импульсном представлении, которая дается матричным элементом оператора эволюции $\hat{U}(-\infty, 0)$, т. е. содержит энергетический знаменатель вместо δ -функции, выражающей закон сохранения в S -матрице:

$$\Psi_{\gamma^*}(z, \vec{p}) = \frac{e Q_q}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \times \sqrt{\frac{z(1-z)}{2}} \frac{\bar{u}(z, \vec{p}) \not{\epsilon}_{\gamma^*} v(1-z, -\vec{p})}{\vec{p}^2 + z(1-z)Q^2},$$

$u(z, \vec{p})$ и $v(1-z, -\vec{p})$ – дираковские спиноры для кварка и антикварка; $\not{\epsilon}_{\gamma^*}$ – вектор поляризации гамма-кванта. Используя оптическую теорему, полное сечение $\sigma_{dp}(\rho, Y)$ взаимодействия диполя с мишенью можно

выразить через мнимую часть амплитуды рассеяния вперед диполя на мишени:

$$\sigma_{dp}(\rho, Y) = 2 \int d^2 b N(\vec{x}_{01}, \vec{b}, Y), \quad (16)$$

где интегрирование ведется по всем прицельным параметрам диполя $\vec{b} = \frac{1}{2}(\vec{x}_0 + \vec{x}_1)$.

Уравнение эволюции в дипольной картине. Вывод уравнения эволюции по x [72] основан на двухглюонной природе взаимодействия с мишенью (рис. 12). В первом приближении $\sigma_{dp}(\rho, Y)$ представляется сечением упругого рассеяния $\sigma_0(\rho)$ цветового диполя $q\bar{q}$ на мишени. В следующем рождается дополнительный глюон, при этом система $q\bar{q}g$ находится в синглете по цвету. При двухглюонном взаимодействии сечение рассеяния $q\bar{q}g$ состояния можно записать через сечение σ_0

$$\sigma_3(r, \rho_1, \rho_2) = \frac{9}{8}(\sigma_0(\rho_1) + \sigma_0(\rho_2)) - \frac{1}{8}\sigma_0(r),$$

где $\rho_{1,2}$ – расстояния между кварком (антикварком) и глюоном, $\vec{r} = \vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2$. Коэффициенты перед $\sigma_0(\rho_1)$, $\sigma_0(\rho_2)$ и $\sigma_0(r)$ в этой формуле определяются цветовой алгеброй. Их легко найти с учетом того, что $\sigma_0(\rho) = 0$ (диполь нулевого размера не взаимодействует) из следующих простых соображений. Коэффициенты перед $\sigma_0(\rho_1)$ и $\sigma_0(\rho_2)$, очевидно, должны быть одинаковыми. При $r \rightarrow 0$ (кварк-антикварковая пара неотличима от глюона) отношение $\sigma_3(0, \rho, \rho)$ к $\sigma_0(\rho)$ должно быть равно отношению ок-

тетной и триплетной констант связи $C_A/C_F = 9/4$ при $N_c = 3$. Когда же $\rho_1 = 0$, то глюон вместе с кварком неотличимы от одного кварка, и $\sigma_3(r, 0, r) = \sigma_3(r, r, 0) = \sigma_0(r)$.

Разница сечений рассеяния $q\bar{q}g$ и $q\bar{q}$ состояний:

$$\Delta\sigma(r, \rho_1, \rho_2) = \sigma_3(r, \rho_1, \rho_2) - \sigma_0(r) = \frac{9}{8}(\sigma_0(\rho_1) + \sigma_0(\rho_2) - \sigma_0(r)). \quad (17)$$

Если $\psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, z, z_g)$ – волновая функция $q\bar{q}g$ состояния в координатном представлении (z_g – доля импульса, уносимая глюоном), то число глюонов записывается как

$$n_g = \int dz_g d^2 \rho_1 dz d^2 r |\psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, z, z_g)|^2.$$

Легко получить (см. ниже), что

$$|\psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, z, z_g)|^2 = \frac{\alpha_s}{z_g} \frac{4}{3\pi^2} |\psi^{(0)}(z, \vec{r})|^2 \left(\frac{\vec{\rho}_1}{\rho_1^2} - \frac{\vec{\rho}_2}{\rho_2^2} \right)^2, \quad (18)$$

где $\psi^{(0)}(z, r)$ – волновая функция $q\bar{q}$ диполя. Увеличение сечения за счет $q\bar{q}g$ состояния

$$\Delta\sigma_{tot}(q\bar{q}g, x, Q^2) = \int dz d^2 r dz_g d^2 \rho_1 \times \\ \times |\psi^{(1)}(\vec{r}, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, z, z_g)|^2 \Delta\sigma(r, \rho_1, \rho_2),$$

откуда с учетом (18) получаем:

$$\Delta\sigma_{dp}(r, Y) = \int dz_g d^2 \rho_1 \frac{\alpha_s}{z_g} \frac{4}{3\pi^2} \left(\frac{\vec{\rho}_1}{\rho_1^2} - \frac{\vec{\rho}_2}{\rho_2^2} \right)^2 \times \\ \times \Delta\sigma(r, \rho_1, \rho_2).$$

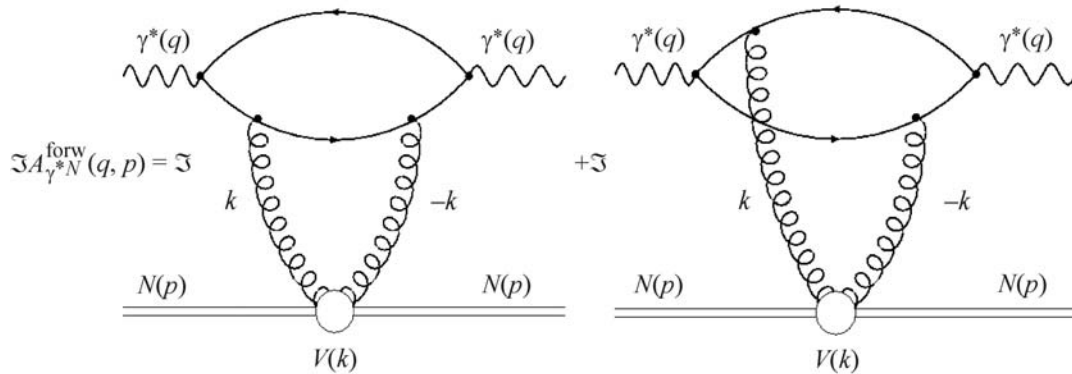


Рис. 12. Мнимая часть амплитуды рассеяния диполя на ядре N

Используя (17), переходя к прицельным параметрам кварка, антикварка и глюона $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ и $\vec{\rho}$, так что $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $\vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{\rho}$, $\vec{\rho}_2 = \vec{r}_2 - \vec{\rho}$, и учитывая, что интегрирование по z_g дает Y , последнее выражение можно представить в виде

$$\Delta\sigma_{dp}(r, Y) = Y \left[\hat{K}_{dip} \sigma_0 \right](r), \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} \left[\hat{K}_{dip} \sigma_0 \right](r) = & \frac{\alpha_s N_c}{2\pi^2} \int d^2\rho \frac{\vec{r}^2}{(\vec{r}_1 - \vec{\rho})^2 (\vec{r}_2 - \vec{\rho})^2} \times \\ & \times (\sigma_0(|\vec{r}_1 - \vec{\rho}|) + \sigma_0(|\vec{r}_2 - \vec{\rho}|) - \sigma_0(r)) \end{aligned} \quad (20)$$

при $N_c = 3$.

В более высоких порядках теории возмущений нужно учитывать состояния с произвольным числом глюонов. Основной вклад в ГЛП будут давать глюоны, упорядоченные по продольным импульсам:

$$x \ll z_n \ll \dots \ll z_1 \ll z \ll 1.$$

Отсюда, имея в виду вклад (19) в сечение от излучения дополнительного глюона, можно написать уравнение эволюции по быстроте для дипольного сечения:

$$\frac{\partial \sigma_{dp}(r, Y)}{\partial Y} = \hat{K}_{dip} \sigma_{dp}(r, Y), \quad (21)$$

где $\hat{K}_{dip}$ представляет дипольное ядро, определенное в (20).

Производящий функционал для цветовых диполей. В работе Мюллера [71] вывод дипольного уравнения эволюции основан на анализе волновой функции связанного состояния тяжелой кварк-антикварковой пары («ониума») в системе бесконечного импуль-

са этой пары. Пара бралась тяжелой для обеспечения применимости теории возмущений. Мы будем вместо «ониума» говорить о виртуальном фотоне γ^* . В пределе большого числа цветов для вероятностей найти в виртуальном фотоне кварк-антикварковую пару и произвольное число глюонов с малыми и сильно упорядоченными долями продольных импульсов в представлении прицельных параметров была получена факторизованная форма. Предел большого числа цветов $N_c \rightarrow \infty$ нужен для того, чтобы каждый из излученных глюонов мог быть представлен в виде кварк-антикварковой пары.

Начнем с древесного (борновского) приближения. Пусть $\Phi^{(0)}(\vec{x}_1, z_1) = \sum_{\alpha\beta} |\Psi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{x}_1, z_1)|^2$ – вероятность найти кварк-антикварковую пару (рис. 13, в); z_1 – доля продольного импульса фотона γ^* , уносимая антикварком диполя, а $\vec{x}_1$ – поперечная координата этого антикварка (поперечная координата кварка считается равной нулю). В импульсном представлении для амплитуды вероятности найти пару и глюон с долей продольного импульса $z_2 \ll z_1, z_2 \ll 1 - z_1$ имеем (рис. 13, а, б)

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha\beta}^{(1)a}(\vec{k}_1, \vec{k}_2; z_1, z_2) = & -2gt^a \left[\Psi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{k}_1, z_1) - \right. \\ & \left. - \Psi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, z_1) \right] \frac{\vec{k}_2 \cdot \vec{\epsilon}_2^\lambda}{\vec{k}_2^2} \end{aligned} \quad (22)$$

где $\vec{k}_1$ и $\vec{k}_2$ – поперечные импульсы антикварка и глюона; $\vec{\epsilon}_2^\lambda$ – физический вектор поляризации глюона. Заметим, что поперечный импульс глюона не предполагается малым (в соответствии с BFKL подходом).

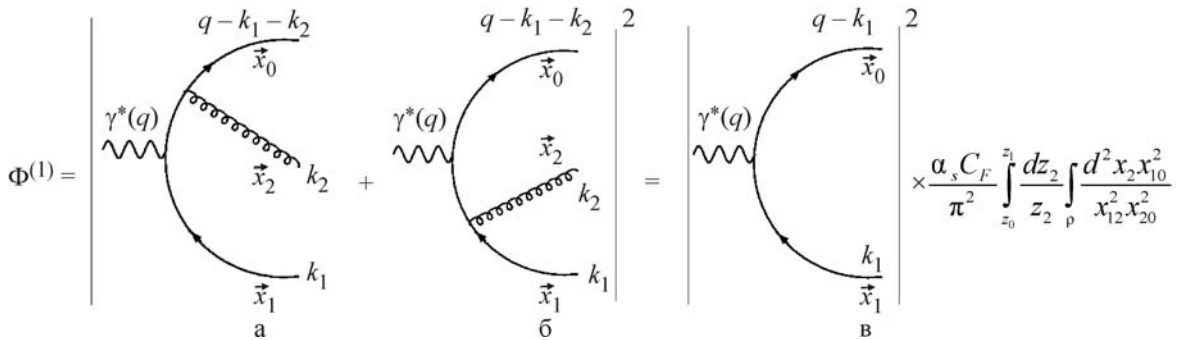


Рис. 13. Одноглюонное излучение кварком и антикварком диполя (а, б) факторизуется в борновскую часть (в) и фактор излучения. Здесь рассматривается квадрированный матричный элемент оператора эволюции $\hat{U}(-\infty, 0)$

Квадрат величины $\Psi_{\alpha\beta}^{(1)a}(\vec{k}_1, \vec{k}_2; z_1, z_2)$, проинтегрированный по фазовому объему глюона, дает

$$\Phi^{(1)}(\vec{k}_1, z_1) = \int \frac{d^2 k_2}{(2\pi)^3} \int_{z_0}^{z_1} \frac{dz_2}{2z_2} \times \\ \times \sum_{a, \alpha, \beta} |\Psi_{\alpha\beta}^{(1)a}(\vec{k}_1, \vec{k}_2; z_1, z_2)|^2.$$

Интегрирование по продольной координате z_2 производится с логарифмической точностью от параметра коллинеарного обреза z_0 до z_1 . Интегрирование по k_2 содержит ультрафиолетовую расходимость, для которой ниже вводится параметр обреза в координатном представлении.

Легко проверить, что в координатном представлении амплитуда (22) приобретает факторизованный вид:

$$\Psi_{\alpha\beta}^{(1)a}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; z_1, z_2) = \\ = -\frac{igt^a}{\pi} \Psi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{x}_1, z_1) \left(\frac{\vec{x}_{20}}{x_{20}^2} - \frac{\vec{x}_{21}}{x_{21}^2} \right) \cdot \vec{\epsilon}_2^\lambda \quad (23)$$

Соответственно после квадрирования (23) в координатном представлении получаем факторизованный вид вероятности

$$\Phi^{(1)}(\vec{x}_1, z_1) = \int \frac{d^2 x_2}{(2\pi)^3} \int_{z_0}^{z_1} \frac{dz_2}{2z_2} \times \\ \times \sum_{\alpha\beta, \lambda, a} |\Psi_{\alpha\beta}^{(1)a}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; z_1, z_2)|^2 = \\ = \Phi^{(0)}(\vec{x}_1, z_1) \int_{z_0}^{z_1} \frac{dz_2}{z_2} \int_p d^2 x_2 \frac{\alpha_s C_F}{\pi^2} \frac{x_{10}^2}{x_{20}^2 x_{21}^2}; \\ C_F \equiv \frac{N_c^2 - 1}{2N_c} \approx \frac{N_c}{2}; x_{ij} = \vec{x}_i - \vec{x}_j.$$

Перейдем к вероятности найти кварк-антикварковую пару и два глюона. Напомним, что в ГЛП глюоны должны быть сильно упорядочены по быстрой, так что каждый следующий глюон имеет долю продольного импульса много меньшую, чем предыдущий. Предел $N_c \rightarrow \infty$ позволяет сделать одинаковым цветовой коэффициент от различных присоединений линии дополнительного глюона, поскольку в этом пределе только планарные диаграммы дают вклад в вероятность. Поэтому следующий глюон, например глюон с импульсом k_3 , при рассмотрении величины $\Phi^{(2)}(\vec{x}_1, z_1) \sim \sum_{a, b, \alpha, \beta} |\Psi_{\alpha\beta}^{(2)a, b}|^2$, будучи при-

соединенным к кварковой линии исходного диполя или к антикварковой линии глюона k_2 в диаграмме для $\Psi^{(2)}$, должен в диаграмме для $\Psi^{(2)*}$ быть присоединенным к этим же линиям. При сильном упорядочении по быстрой такое присоединение даст множитель

$$dw_{02}^3 = \frac{\alpha_s C_F}{\pi^2} \frac{x_{20}^2 d^2 x_3}{x_{30}^2 x_{32}^2} \frac{dz_3}{z_3}.$$

Аналогично присоединение линии глюона с импульсом k_3 к антикварковой линии исходного диполя или к кварковой линии глюона k_2 даст множитель dw_{12}^3 . В результате

$$\Phi^{(2)}(\vec{x}_1, z_1) = \Phi^{(0)}(\vec{x}_1, z_1) \left(\frac{4\alpha C_F}{\pi} \right)^2 \times \\ \times \frac{\ln^2(z_1/z_0)}{2} \int \frac{x_{01}^2 d^2 x_2}{x_{20}^2 x_{21}^2} \left[\int \frac{x_{20}^2 d^2 x_3}{x_{30}^2 x_{32}^2} + \int \frac{x_{21}^2 d^2 x_3}{x_{32}^2 x_{31}^2} \right],$$

где квадрат большого логарифма возник от интегрирования по продольным импульсам.

Переход к вероятности найти диполь и n глюонов может быть сделан с помощью формализма производящего функционала. Роль этого функционала заключается в рекурсивном воспроизведении диаграммной процедуры перехода от $n-1$ глюона к n глюонам, когда n -й глюон дает множитель dw_{ij}^n , прицепляясь между кварком i -го глюона (при $i=0$ это исходный кварк) и антикварком j -го глюона (при $j=1$ это исходный антикварк). Это позволяет [71] получить для непроинтегрированной вероятности $\phi^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_{n+1}; z_1, z_2, \dots, z_{n+1})$ – т. е. вероятности нахождения в диполе кроме кварка и антикварка n глюонов с поперечными координатами $\vec{x}_2, \dots, \vec{x}_{n+1}$ и продольными импульсами $z_2 \gg z_3 \gg \dots \gg z_{n+1}$ – следующее выражение:

$$\phi^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_{n+1}; z_1, z_2, \dots, z_{n+1}) = \\ = \Phi^{(0)}(\vec{x}_1, z_1) \left(\frac{\delta}{\delta u(\vec{x}_2, z_2)} \frac{\delta}{\delta u(\vec{x}_3, z_3)} \dots \right. \\ \left. \dots \frac{\delta}{\delta u(\vec{x}_{n+1}, z_{n+1})} Z^{(0)}(\vec{x}_1, \vec{x}_0, z_1, u) \right) \Bigg|_{u=0}, \quad (24)$$

где производящий функционал $Z^{(0)}(\vec{x}_1, \vec{x}_0, z_1, u)$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$\begin{aligned}
Z^{(0)}(\vec{x}_1, \vec{x}_0, z_1, u) = & 1 + \frac{\alpha_s C_F}{\pi^2} \int_{\rho} \frac{d^2 x'_2}{x_{2'0}^2 x_{2'1}^2} \times \\
& \times \int_{z_0}^{z_1} \frac{dz'_2}{z'_2} u(\vec{x}_2, z'_2) Z^{(0)}(\vec{x}_2, \vec{x}_1, z'_2, u) \times \\
& \times Z^{(0)}(\vec{x}_2, \vec{x}_0, z'_2, u).
\end{aligned} \quad (25)$$

Заметим, что в целях регуляризации расходимости интеграла по $\vec{x}'_2$ необходимо ввести параметр обрезания ρ , например, ограничив область интегрирования в (25) условиями $x_{2'0}^2 \geq \rho^2$ и $x_{2'1}^2 \geq \rho^2$.

Функционал $Z^{(0)}$ дает распределение вероятностей для глюонов в древесном приближении, без учета виртуальных поправок. Кроме того, он не дает вероятности найти один диполь. Пусть Z – функционал, дающий распределение всех вероятностей с учетом виртуальных поправок. Заметим, что тогда при $u=1$ он, как видно из (24), дает вероятность найти диполь с любым числом глюонов, т. е. должен быть равен 1. Используя еще тот факт, что вероятность найти один диполь дается судаковским формфактором, можно прийти к следующему уравнению для него [73]:

$$\begin{aligned}
Z(\vec{b}_0, \vec{x}_{01}, Y, u) = & u(\vec{b}_0, \vec{x}_{01}) \exp \left[-\frac{4\alpha_s C_F}{\pi} \times \right. \\
& \times \ln \left(\frac{x_{01}}{\rho} \right) Y \left. \right] + \frac{\alpha_s C_F}{\pi^2} \int_0^Y dy \int_{\rho} d^2 x'_2 \frac{x_{01}^2}{x_{02'}^2 x_{12'}^2} \times \\
& \times \exp \left[-\frac{4\alpha_s C_F}{\pi} \ln \left(\frac{x_{01}}{\rho} \right) (Y - y) \right] \times \\
& \times Z(\vec{b}_0 + \frac{1}{2} \vec{x}_{12'}, \vec{x}_{02'}, y, u) \times \\
& \times Z(\vec{b}_0 - \frac{1}{2} \vec{x}_{2'0}, \vec{x}_{12'}, y, u).
\end{aligned} \quad (26)$$

Здесь мы несколько изменили обозначения: от координаты кварка ($\vec{x}_0$) и антикварка диполя ($\vec{x}_1$) мы перешли к прицельному параметру диполя $\vec{b}_0 = \frac{1}{2}(\vec{x}_0 + \vec{x}_1)$ и к относительному поперечному размеру $\vec{x}_{01} = \vec{x}_0 - \vec{x}_1$. Вместо доли продольного импульса z в уравнении (26) использована быстрота y ; $Y = \ln(1/x)$, где $x = \frac{Q^2}{s}$ имеет обычный смысл бьёркеновской переменной для процесса рассеяния виртуального гамма-кванта на мишени. Напомним, ρ имеет все тот же смысл ультрафиолетового обрезания, сокращающегося при рассмотрении физически наблюдаемых величин.

В работе [73] этот функционал использовался для вывода дипольного уравнения эволюции (20), (21).

Дипольная форма ядра BFKL

Изначально подход BFKL формулировался в импульсном представлении. Импульс-факторы и ядро уравнения BFKL для функций Грина были определены в пространстве поперечных импульсов. Ядро известно сейчас для произвольных передач импульса и всех возможных цветовых состояний в t -канале [57–59]. Для феноменологических применений наиболее важно бесцветное состояние – померонный канал. Отличительной чертой ядра в померонном канале является сокращение инфракрасных расходимостей. В дальнейшем только этот канал и рассматривается.

Для рассеяния бесцветных объектов уравнение BFKL можно использовать в специальном представлении, в котором ядро уравнения в ГЛП обладает замечательным свойством: оно инвариантно относительно конформных преобразований в пространстве прицельных параметров [74]. Конформная инвариантность ядра в этом представлении делается очевидной при переходе из импульсного в координатное пространство. Мы будем называть форму ядра в координатном пространстве в этом представлении дипольной формой ядра BFKL, поскольку она совпадает в ГЛП с ядром модели цветовых диполей [72; 75; 76]. Эти обстоятельства делают очень интересной задачу нахождения дипольной формы ядра в СГЛП. Конечно, в КХД конформная инвариантность нарушается перенормировкой. Но если перенормировки являются единственным источником нарушения, то можно рассчитывать на конформную инвариантность ядра в суперсимметричных обобщениях КХД. Дипольная форма ядра очень полезна для лучшего понимания связи подхода BFKL с моделью цветовых диполей, что важно для дальнейшего развития теоретического описания полужестких процессов.

Координатное представление ядра BFKL в ГЛП. В главном логарифмическом приближении ядро BFKL дается формулами (8)–(13). Прямое преобразование Фурье дает

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = & \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K}_{dip} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle - \\ & - \frac{g^2 N_c \Gamma^2 (1 + \varepsilon)}{8\pi^{3+2\varepsilon}} \left[\frac{\delta(\vec{r}_{11'})}{\vec{r}_{12'}^{2(1+2\varepsilon)}} + \frac{\delta(\vec{r}_{22'})}{\vec{r}_{21'}^{2(1+2\varepsilon)}} - \right. \\ & \left. - 2 \frac{\delta(\vec{r}_{12'})}{\vec{r}_{11'}^{2(1+\varepsilon)} \vec{r}_{22'}^{2(1+\varepsilon)}} \right], \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K}_{dip} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = & \frac{g^2 N_c \Gamma^2 (1 + \varepsilon)}{8\pi^{3+2\varepsilon}} \times \\ & \times \int d^{2+2\varepsilon} \rho \left(\frac{\vec{r}_{1\rho}}{\vec{r}_{1\rho}^{2(1+\varepsilon)}} - \frac{\vec{r}_{2\rho}}{\vec{r}_{2\rho}^{2(1+\varepsilon)}} \right)^2 \times \\ & \times (\delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{2\rho}) + \delta(\vec{r}_{22'}) \delta(\vec{r}_{1\rho}) - \delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{22'})) \end{aligned}$$

есть ядро модели цветowych диполей в $(D-2)$ -мерном пространстве. Здесь и ниже $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $\vec{r}_{i'j'} = \vec{r}'_i - \vec{r}'_j$, $\vec{r}_{ij'} = \vec{r}_i - \vec{r}'_j$, $\vec{r}_{i\rho} = \vec{r}_i - \vec{\rho}$.

При $D=4$ $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K}_{dip} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle$ приобретает хорошо известную форму:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K}_{dip} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = & \frac{\alpha_s N_c}{2\pi^2} \int d^2 \rho \frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{1\rho}^2 \vec{r}_{2\rho}^2} \times \\ & \times (\delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{2\rho}) + \delta(\vec{r}_{22'}) \delta(\vec{r}_{1\rho}) - \\ & - \delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{22'})). \end{aligned}$$

Видно, что ядро BFKL не эквивалентно ядру модели цветowych диполей, а является более общим, чем последнее. На самом деле это ясно изначально, поскольку ядро BFKL может использоваться для рассеяния не только для бесцветных, но и для цветных объектов.

Однако, когда оно применяется для рассеяния бесцветных объектов, можно взять импакт-фактор мишени в «дипольной» форме и использовать «калибровочную инвариантность» импакт-фактора налетающей частицы [74], что позволяет опустить в ядре члены, пропорциональные $\delta(\vec{r}_{12'})$, так же как изменить члены, не зависящие либо от $\vec{r}_1$, либо от $\vec{r}_2$ таким образом, что получившееся в результате ядро сохраняет свойство дипольности.

В самом деле, для бесцветных объектов импакт-факторы в представлении (7) «калибровочно инвариантны»:

$$\langle A' \bar{A} | \vec{q}, 0 \rangle = \langle A' \bar{A} | 0, \vec{q} \rangle = 0.$$

Поэтому $\langle A' \bar{A} | \Psi \rangle = 0$, если $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \Psi \rangle$ не зависят либо от $\vec{r}_1$, либо от $\vec{r}_2$. Так как

$\langle \vec{q}_1, \vec{q}_2 | \hat{K}_r | \vec{q}_1, \vec{q}_2 \rangle$ исчезает при $\vec{q}_1 = 0$ или $\vec{q}_2 = 0$, $\langle A' \bar{A} | \hat{K}$ также «калибровочно инвариантны». Это значит, что мы можем заменить $|In\rangle \equiv (\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2)^{-1} |\bar{B}' B\rangle$ на $|In_d\rangle$, где $|In_d\rangle$ обладает свойством дипольности: $\langle \vec{r}, \vec{r} | In_d \rangle = 0$. После этого можно опустить члены пропорциональные $\delta(\vec{r}_{12'})$, а члены, не зависящие либо от $\vec{r}_1$, либо от $\vec{r}_2$, изменить так, что $\hat{K} \rightarrow \hat{K}_{dip}$ со свойством $\langle \vec{r}, \vec{r} | \hat{K}_{dip} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = 0$.

Дипольная форма ядра BFKL в СГЛП может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{K}_d^{NLO} | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = & \frac{\alpha_s^2(\mu) N_c^2}{4\pi^3} \times \\ & \times [\delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{22'}) \int d^2 \rho g^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) + \\ & + \delta(\vec{r}_{11'}) g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_2) + \delta(\vec{r}_{22'}) g(\vec{r}_2, \vec{r}_1; \vec{r}'_1) + \\ & + \frac{1}{\pi} g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2)] \end{aligned} \quad (27)$$

с функцией g , обращающейся в нуль при совпадении ее первых двух аргументов. Первые три члена содержат ультрафиолетовые расходимости, которые сокращаются между собой так же, как и в ГЛП, с учетом свойства дипольности импакт-факторов мишени. Коэффициент при $\delta(\vec{r}_{11'}) \delta(\vec{r}_{22'})$ записан в интегральной форме для того, чтобы сделать это сокращение явным. Слагаемое с $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2)$ отсутствует в ГЛП, так как в импульсном пространстве ядро не содержит членов, зависящих одновременно от трех независимых импульсов.

Скачки (7) инвариантны относительно операторного преобразования

$$\begin{aligned} \hat{K} \rightarrow \hat{O}^{-1} \hat{K} \hat{O}, \quad \langle A' \bar{A} | \rightarrow \langle A' \bar{A} | \hat{O}, \\ \frac{1}{\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2} |\bar{B}' B\rangle \rightarrow \hat{O}^{-1} \frac{1}{\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2} |\bar{B}' B\rangle. \end{aligned}$$

Это свойство позволяет использовать ядро в разных формах. В ГЛП форма ядра фиксировалась требованием конформной инвариантности. Но в СГЛП и после этого еще возможны преобразования с $\hat{O} = 1 + \hat{\Theta}$, где $\hat{\Theta} \sim g^2$. При этом

$$\hat{K} \rightarrow \hat{K} - [\hat{K}^B, \hat{\Theta}], \quad (28)$$

где $\hat{K}^B$ – ядро ГЛП. Эти преобразования перераспределяют поправки к ядру и им-

пакт-факторам и могут быть использованы для упрощения дипольной формы ядра.

Простейшая часть ядра BFKL в СГЛП – «неабелевская» (главная по N_c) часть кваркового вклада в ядро. Она известна при произвольных D [57]. Ее дипольная форма найдена также при произвольных D [77]. Оказывается, что дипольная форма исходной «неабелевской» части [77] содержит члены $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2')$ и не очень проста. Но операторное преобразование (28) с

$$\hat{\Theta}_Q = \frac{\alpha_s(\mu)}{8\pi} \frac{2}{3} n_f \ln(\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2) \quad (29)$$

удаляет эти члены и значительно упрощает дипольную форму, которая при $D=4$ приобретает вид (27) с

$$\begin{aligned} g_Q(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) &= -g_Q^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) = \\ &= \frac{n_f}{3N_c} \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{1p}^2 \vec{r}_{2p}^2} \ln \frac{\vec{r}_Q^2}{\vec{r}_{12}^2} + \frac{\vec{r}_{1p}^2 - \vec{r}_{2p}^2}{\vec{r}_{1p}^2 \vec{r}_{2p}^2} \ln \frac{\vec{r}_{1p}^2}{\vec{r}_{2p}^2} \right), \end{aligned}$$

где

$$\ln \vec{r}_Q^2 = -\frac{5}{3} + 2\psi(1) - \ln \frac{\mu^2}{4}.$$

Этот результат согласуется с кварковым вкладом в ядро в модели цветных диполей [78].

«Абелевская» часть кваркового вклада в импульсном представлении с точностью до коэффициента совпадает с вычисленной много лет назад в КЭД [79; 80] и очень сложна. Оказывается, однако, что ее дипольная форма чрезвычайно проста. Она содержит только $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2')$:

$$\begin{aligned} g_Q(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2') &= \frac{n_f}{N_c^3} \frac{1}{\vec{r}_{12'}^4} \times \\ &\times \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{1'2}^2 + \vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2 - \vec{r}_{12}^2 \vec{r}_{1'2'}}{2(\vec{r}_{12}^2 \vec{r}_{1'2}^2 - \vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2)} \ln \frac{\vec{r}_{12}^2 \vec{r}_{1'2}^2}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} - 1 \right), \end{aligned}$$

совпадает с соответствующей частью кваркового вклада в ядро в модели цветных диполей [78] и конформно инвариантна. Последнее обстоятельство особенно интересно для померона в КЭД.

Преобразование (28) с $\hat{\Theta} = \hat{\Theta}_Q$ (29) удаляет кварковую часть СГЛП поправок из импакт-факторов, так что все кварковые поправки оказываются включенными в ядро. Для глюонного вклада преобразование с

таким свойством не найдено. Было бы чудом, если бы оно вообще существовало.

Преобразование для кваркового вклада связано с перенормировкой заряда. Представляется разумным использовать для глюонного вклада аналогичное преобразование, т. е. (28) с

$$\hat{\Theta}_G = \frac{\alpha_s(\mu)}{8\pi} \left(-\frac{11}{3} N_c \right) \ln(\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2).$$

При этом результат [81] имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} g_G^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) &= \frac{3}{2} \frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{1p}^2 \vec{r}_{2p}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{1p}^2}{\vec{r}_{12}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{2p}^2}{\vec{r}_{12}^2} \right) - \\ &- \frac{11}{12} \left[\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{1p}^2 \vec{r}_{2p}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{1p}^2 \vec{r}_{2p}^2}{r_G^4} \right) + \left(\frac{1}{\vec{r}_{2p}^2} - \frac{1}{\vec{r}_{1p}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{2p}^2}{\vec{r}_{1p}^2} \right) \right], \\ g_G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_2') &= \frac{11}{6} \frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{22'}^2 \vec{r}_{12'}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{r_G^2} \right) + \\ &+ \frac{11}{6} \left(\frac{1}{\vec{r}_{22'}^2} - \frac{1}{\vec{r}_{12'}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{22'}^2}{\vec{r}_{12'}^2} \right) + \\ &+ \frac{1}{2\vec{r}_{22'}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2}{\vec{r}_{22'}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{12'}^2} \right) - \\ &- \frac{\vec{r}_{12}^2}{2\vec{r}_{22'}^2 \vec{r}_{12'}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{22'}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{12'}^2} \right), \end{aligned}$$

где

$$\ln r_G^2 = 2\psi(1) - \ln \frac{\mu^2}{4} - \frac{3}{11} \left(\frac{67}{9} - 2\zeta(2) \right).$$

Как $g_G^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho})$, так и $g_G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho})$ исчезают при $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$. Они также стремятся к нулю при $\vec{\rho}^2 \rightarrow \infty$ быстрее, чем $(\vec{\rho}^2)^{-1}$, что обеспечивает отсутствие инфракрасных расходимостей. Ультрафиолетовые сингулярности при $\vec{\rho} = \vec{r}_2$ и $\vec{\rho} = \vec{r}_1$ сокращаются с учетом дипольности импакт-факторов мишени.

Наиболее сложной является структура, отсутствующая в ГЛП:

$$\begin{aligned} g_G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2') &= \left[\frac{(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{12})}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22}^2 \vec{r}_{12'}^2} - \frac{2(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{11'})}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22}^2 \vec{r}_{12'}^2} + \right. \\ &+ \left. \frac{2(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{12})(\vec{r}_{11'} \vec{r}_{12'})}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22}^2 \vec{r}_{12'}^2} \right] \ln \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{12'}^2} \right) + \\ &+ \frac{1}{2\vec{r}_{12'}^2} \left[\frac{(\vec{r}_{11'} \vec{r}_{22'})}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22}^2} + \frac{(\vec{r}_{21'} \vec{r}_{12})}{\vec{r}_{21'}^2 \vec{r}_{12}^2} - \frac{2(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{21'})}{\vec{r}_{22}^2 \vec{r}_{21'}^2} \right] \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \ln \left(\frac{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2}{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{21'}^2} \right) + \frac{(\vec{r}_{11'} \vec{r}_{22'})}{2\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2 \vec{r}_{12'}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{21'}^2 \vec{r}_{12'}^2}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} \right) + \\
 & + \frac{1}{d\vec{r}_{12'}^2} \left[\frac{(\vec{r}_{12'} \vec{r}_{21'}) \vec{r}_{12'}^2}{\vec{r}_{11'}^2} + \frac{2(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{21'}) (\vec{r}_{12'} \vec{r}_{21'})}{\vec{r}_{21'}^2} + \right. \\
 & + \left. \frac{(\vec{r}_{22'} \vec{r}_{12'}) (\vec{r}_{11'} \vec{r}_{21'})}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} \vec{r}_{12'}^2 - \vec{r}_{12'}^2 \right] \ln \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{21'}^2}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} \right) + \\
 & + \frac{1}{2\vec{r}_{12'}^4} \left(\frac{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2}{d} \ln \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{21'}^2}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} \right) - 1 \right) + \\
 & + \frac{1}{\vec{r}_{11'}^2} \left(\frac{(\vec{r}_{12'} \vec{r}_{21'})}{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{21'}^2} - \frac{(\vec{r}_{11'} \vec{r}_{12})}{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{22'}^2} - \frac{(\vec{r}_{11'} \vec{r}_{21'})}{\vec{r}_{22'}^2 \vec{r}_{21'}^2} \right) \ln \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2}{\vec{r}_{11'}^2} \right) - \\
 & - \frac{(\vec{r}_{12'} \vec{r}_{22'})}{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{22'}^2 \vec{r}_{12'}^2} \ln \left(\frac{\vec{r}_{11'}^2}{\vec{r}_{12'}^2} \right) + (1 \leftrightarrow 2), \quad (30)
 \end{aligned}$$

где

$$d = \vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{21'}^2 - \vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2.$$

Этот член также стремится к нулю при $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, так что обладает свойством дипольности. Он имеет ультрафиолетовую сингулярность только при $\vec{r}_{12'} = 0$ и стремится к нулю при больших $\vec{r}_{1'}^2$ и $\vec{r}_{2'}^2$ достаточно быстро, чтобы обеспечить отсутствие инфракрасных расходимостей.

Член (30) нарушает конформную инвариантность, хотя и не имеет отношения к перенормировкам. Напомним, однако, возможность операторных преобразований (28). Остается до сих пор неясным, можно ли найти такое преобразование, которое устранило бы нарушающие конформную инвариантность члены.

BFKL в суперсимметричных обобщениях КХД. Суперсимметричные обобщения КХД содержат глюоны и майорановские фермионы в присоединенном представлении цветовой группы. Глюонный вклад в ядро BFKL остается таким же, как и в КХД. Фермионный вклад может быть получен заменами групповых коэффициентов:

$$n_f \rightarrow n_M N_c$$

для «неабелевской» части, и

$$n_f \rightarrow -n_M N_c^3$$

для «абелевской»; n_M — число ароматов майорановских фермионов. Для расширенной N -суперсимметрии $n_M = N$.

При $N > 1$ кроме кварков имеется n_s скалярных частиц; $n_s = 2$ при $N = 2$ и $n_s = 6$ при $N = 4$.

Аналогично кварковому случаю, удобно разделить вклад скалярных частиц на две части, с теми же групповыми коэффициентами. После преобразования (28) с

$$\hat{\Theta} = -\frac{\alpha_s(\mu) N_c}{8\pi} \left(\frac{11}{3} - \frac{2}{3} n_M - \frac{1}{6} n_s \right) \ln(\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2),$$

«неабелевская» часть дает вклад только в $g_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho})$ и $g_s^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho})$. При этом

$$\begin{aligned}
 g_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) &= -g_s^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\rho}) = \\
 &= \frac{n_s}{12} \left(\frac{\vec{r}_{12}^2}{\vec{r}_{1\rho}^2 \vec{r}_{2\rho}^2} \ln \frac{\vec{r}_s^2}{\vec{r}_{12}^2} + \frac{\vec{r}_{1\rho}^2 - \vec{r}_{2\rho}^2}{\vec{r}_{1\rho}^2 \vec{r}_{2\rho}^2} \ln \frac{\vec{r}_{1\rho}^2}{\vec{r}_{2\rho}^2} \right),
 \end{aligned}$$

где $\ln \vec{r}_s^2 = -\frac{8}{3} + 2\psi(1) - \ln \frac{\mu^2}{4}$. «Абелевская часть» дает вклад только в $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2')$:

$$\begin{aligned}
 g_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2') &= \frac{n_s}{2} \frac{1}{\vec{r}_{12'}^4} \times \\
 &\times \left(\frac{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{1'2'}^2}{(\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{1'2'}^2 - \vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2)} \ln \frac{\vec{r}_{12'}^2 \vec{r}_{1'2'}^2}{\vec{r}_{11'}^2 \vec{r}_{22'}^2} - 1 \right).
 \end{aligned}$$

Она явно конформно инвариантна.

При $N = 4$

$$\frac{11}{3} - \frac{2}{3} n_M - \frac{1}{6} n_s = 0,$$

α_s не зависит от μ и

$$\hat{\Theta} = -\frac{\alpha_s(\mu) N_c}{8\pi} \left(\frac{11}{3} - \frac{2}{3} n_M - \frac{1}{6} n_s \right) \ln(\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2) = 0.$$

К сожалению, полного сокращения членов, нарушающих конформную инвариантность, не происходит. Однако надежда добиться его с помощью преобразования (28) остается.

Уравнения эволюции при высокой плотности

Нарушение унитарного предела, обсуждавшееся выше, с учетом глюонной плотности означает слишком быстрый ее рост при малых x . Величина $F(x, \vec{q})$, определенная соотношением

$$\begin{aligned}
 \delta(\vec{q}_B) F(x, \vec{q}^2) &= \frac{\vec{q}^4 (N_c^2 - 1)}{4 p_B^- (2\pi)^2} \times \\
 &\times \langle \vec{q}, -\vec{q} | e^{Y_{\hat{K}}} \frac{1}{\hat{q}_1^2 \hat{q}_2^2} | \bar{B} B \rangle
 \end{aligned} \quad (31)$$

и являющаяся (с точностью до коэффициента) в подходе BFKL мнимой частью амплитуды рассеяния реджезованного глюона на мишени B , в пределе больших $\bar{q}^2$ может быть выражена через глюонную функцию распределения в мишени B $G(x, Q^2) \equiv f_B^g(x, Q^2)$:

$$F(x, Q^2) = x \frac{\partial G(x, Q^2)}{\partial Q^2} \quad (32)$$

(коэффициенты в (31) легко получить, сравнивая левую и правую части (32) в борновском приближении и взяв в качестве мишени кварк). Поэтому функцию $F(x, \bar{q}^2)$ называют непроинтегрированным глюонным распределением. При малых x она растет; согласно (14)

$$F(x, Q^2) \propto \left(\frac{1}{x}\right)^{\omega_p},$$

где ω_p – так называемый интерсепт BFKL померона, так что плотность глюонов растет как обратная степень x . При каких-то значениях x (зависящих от Q^2) этот рост должен остановиться (наступить насыщение глюонной плотности). Следует заметить что ω_p зависит от Q^2 , так как выражается через бегущую константу связи. В ГЛП эта зависимость не фиксируется.

Нелинейные эффекты и уравнение GLR. Значительный вклад в понимание явлений, связанных с большой плотностью, внесла работа [82]. Если рассматривать эволюцию глюонной плотности по x при фиксированных Q^2 , то насыщение наступает при некоторых $x_s(Q^2)$. Можно, наоборот, при фиксированных x двигаться по Q^2 начиная с больших значений, где плотность не велика из-за малости константы связи, и говорить о кривой насыщения $Q_s^2(x)$. Именно эта терминология и используется начиная с работы [82]. В ней рассмотрение велось в системе бесконечного импульса мишени, и $Q_s^2(x)$ оценивалась как значения Q^2 , при которых они начинают «перекрываться», т. е. сечение их взаимодействия $\sim \alpha_s/Q^2$, умноженное на число глюонов, становится сравнимым с поперечным сечением мишени:

$$\frac{\alpha_s(Q_s^2) x G(x, Q_s^2)}{Q_s^2} \sim \pi R_t^2,$$

где R_t – радиус мишени. При этом становится существенным их взаимодействие («слипание»), которое и останавливает рост глюонной плотности. В настоящее время часто используют несколько другую интерпретацию насыщения и несколько иное определение $Q_s^2(x)$, а именно

$$\frac{F(x, Q_s^2)}{\pi R_t^2} \sim \frac{1}{\alpha_s(Q_s^2)}. \quad (33)$$

Здесь левая часть представляет плотность глюонов в фазовом пространстве (числа заполнения) на масштабе насыщения; большая ($\sim 1/\alpha_s$) величина чисел заполнения допускает классическое описание глюонного поля. Качественно оба определения приводят к одинаковым результатам. Надо иметь в виду, что при этом предполагается, что насыщение достигается в области применимости теории возмущений, т. е. при $\alpha_s(Q_s^2) \ll 1$.

Масштаб насыщения Q_s^2 и характер его зависимости от x определяются мишенью. Для ядра с достаточно большим числом нуклонов $A \gg 1$ Q_s^2 может вообще не зависеть от x . В модели независимых источников в первом приближении по константе связи имеем

$$F(x, Q^2) = A N_c \frac{\alpha_s C_f}{\pi} \frac{1}{Q^2}.$$

Подставляя эту F в (33) и используя то, что $R_A \sim A^{1/3}/M_N^2$, получаем

$$Q_s^2 \sim A^{1/3} \left(\frac{\alpha_s(Q_s^2) N_c}{\pi} \right)^2 M_N^2.$$

При достаточно большом A масштаб насыщения Q_s^2 лежит в области применимости теории возмущений, и наши оценки справедливы при не очень малых x , когда нет необходимости суммировать члены со степенями $\ln(1/x)$, т. е. учитывать BFKL эволюцию. Ее учет приведет к множителю $(1/x)^{\omega_p(Q_s^2)}$.

Уравнение эволюции Грибова – Левина – Рыскина (GLR), полученное в [82] в дважды логарифмическом пределе (т. е. при суммиро-

вании членов вида $(\alpha_s \ln(Q^2/\Lambda_{QCD}^2) \ln(1/x))^n$ в диаграммах глюонной лестницы, см. рис. 11, а), но с учетом «слипания», имеет вид

$$\frac{\partial^2(xG(x, Q^2))}{\partial \ln(1/x) \partial \ln(Q^2/\Lambda_{QCD}^2)} = \frac{\alpha_s N_c}{\pi} xG(x, Q^2) - \frac{4\alpha_s^2 N_c}{3C_F R^2} \frac{1}{Q^2} [xG(x, Q^2)]^2. \quad (34)$$

Уравнение (34) написано для глюонной функции распределения в сферическом протоне с радиусом R . Первый член в этом уравнении отвечает обычной «лестничной» эволюции (см. рис. 11, а). Нелинейный член, подавленный по Q^2 , соответствует учету веерных диаграмм (см. рис. 11, б, в). Вершина расщепления померона (см. рис. 11, б) подавлена как $1/Q^2$. Однако в области очень малых x второй член в правой части (34) становится доминирующим за счет большой величины $xG(x, Q^2)$ и останавливает дальнейший рост глюонной плотности.

В [82] была дана лишь грубая оценка трехпомеронной вершины и не были учтены другие нелинейные эффекты, например слияние померонных каскадов (см. рис. 11, з). Однако уравнение GLR явилось одним из первых нелинейных обобщений подхода BFKL, за которым последовало систематическое развитие нелинейных уравнений эволюции.

Высокоэнергетическое операторное разложение. В работе [83] для описания процессов с малыми x был предложен подход, основанный на применении операторного разложения при высоких энергиях.

В главном логарифмическом приближении все поперечные импульсы одного порядка, а быстроты сильно упорядочены, так что амплитуды в этом подходе факторизуются в пространстве быстрот. Это означает, что амплитуды представляются в виде свертки вкладов от быстрых и медленных полей. Для разделения выбирается быстрота η_0 , которая лежит между быстротой налетающей частицы A и быстротой мишени B . Поля с $\eta > \eta_0$ называют быстрыми, а с $\eta < \eta_0$ медленными (интерпретация этих полей как быстрое и медленное верна только в покоящейся системе отсчета мишени). Вклады быстрых полей дают коэффициентную функцию перед соответствующим оператором, а вклады медленных полей выражаются через матричные элементы от

операторов. Амплитуда процесса $A + B \rightarrow A' + B'$ представляется в виде

$$A_{AB}^{A'B'}(s, t) = \sum \int d^2x_{1\perp} \dots d^2x_{n\perp} C^{i_1 \dots i_n} \times (x_{1\perp}, \dots, x_{n\perp}, \eta_0) \langle B | Tr \{ U_{i_1}(x_{1\perp}) \dots U_{i_n}(x_{n\perp}) \} | B' \rangle,$$

где $x_{k\perp}$ – поперечные координаты; $i_k = 1, 2$, $C(x_{1\perp}, \dots, x_{n\perp}, \eta_0)$ – коэффициентные функции,

$$U_i^n(x_\perp) = U_i^{n\dagger}(x_\perp) \frac{i}{g} \frac{\partial}{\partial x_{i\perp}} U_i^n(x_\perp),$$

где операторы

$$U^n(x_\perp) = P \exp \left(ig \int_{-\infty}^{\infty} du p_\mu^n A^\mu(u p^n + x_\perp) \right),$$

$$p^n = p_1 + e^{-\eta} p_2,$$

называются операторами линий Вильсона. Здесь p_1, p_2 – светоконусные импульсы, близкие к импульсам p_A и p_B соответственно, $p_1^2 = p_2^2 = 0$; $2p_1 p_2 = s$; P означает упорядочение операторов глюонного поля A^μ вдоль пути интегрирования; скобки $\langle \dots \rangle$ показывают усреднение по состоянию мишени, Tr – след матрицы в цветовом пространстве. Здесь и далее используется разложение $p = \alpha p_1 + \beta p_2 + p_\perp$, называемое судаковским, и обозначения $x_- = x p_1, x_+ = x p_2$.

В [83] была получена бесконечная иерархия связанных уравнений для произведений операторов линий Вильсона. В случае, когда мишенью является большое ядро, в пределе большого числа цветов из этой иерархии отщепляется уравнение для среднего значения оператора, представляющего цветовой диполь. В результате получается уравнение на амплитуду рассеяния диполя, являющееся нелинейным обобщением дипольного уравнения (21), (20).

В пространстве прицельных параметров S -матрица для рассеяния цветowego диполя с быстротой η на мишени B получается усреднением по состоянию мишени оператора

$$S^\eta(x_\perp, y_\perp) = \frac{1}{N_c} Tr [U^\eta(x_\perp) U^{\eta\dagger}(y_\perp)]. \quad (35)$$

Входящая в (16) мнимая часть N амплитуды рассеяния вперед диполя на мишени представляется в виде $N^\eta(x_\perp, y_\perp) = 1 - S^\eta(x_\perp, y_\perp)$. Здесь использовано, что в амплитуде рассеяния вперед доминирует

мнимая часть. Чтобы найти уравнение эволюции оператора цветового диполя (35) по η в ГЛП, мы должны рассмотреть его матричный элемент между произвольными состояниями мишени и учесть вклад «быстрых» глюонов (с быстротами $\eta_1 > \eta > \eta_2 = \eta_1 - \Delta\eta$), рассматривая «медленные» глюоны (с $\eta < \eta_2$) как фоновое поле. Ввиду сильной упорядоченности с кварками диполя взаимодействуют только «быстрые» глюоны; при этом для них поле «медленных» сжимается в «ударную волну» (рис. 14). Вклады всех диаграмм выражаются через пропагатор глюона во внешнем поле в виде «ударной волны» [83; 84]:

$$\begin{aligned} \langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \rangle &= \theta(x_+ y_+) \langle x | \frac{g_{\mu\nu}}{i(p^2 + i\epsilon)} | y \rangle - \\ &- \theta(x_+) \theta(-y_+) \int_0^\infty \frac{d\alpha}{2\pi} \frac{e^{-i\alpha(x-y)_-}}{4\alpha^2} \times \\ &\times (x_\perp | e^{-i\frac{p_\perp^2}{\alpha s} x_+} [2\alpha g_{\mu\nu} U + \frac{4}{s} (i\partial_\mu p_{2\nu} U - p_{2\mu} i\partial_\nu U) - \\ &- \frac{4p_{2\mu} p_{2\nu}}{\alpha s^2} \partial_\perp^2 U] e^{i\frac{p_\perp^2}{\alpha s} y_+} | y_\perp \rangle^{ab} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &- \theta(-x_+) \theta(y_+) \int_0^\infty \frac{d\alpha}{2\pi} \frac{e^{-i\alpha(x-y)_-}}{4\alpha^2} \times \\ &\times (x_\perp | e^{-i\frac{p_\perp^2}{\alpha s} x_+} [2\alpha g_{\mu\nu} U^\dagger + \frac{4}{s} (i\partial_\mu p_{2\nu} U^\dagger - p_{2\mu} i\partial_\nu U^\dagger) - \\ &- \frac{4p_{2\mu} p_{2\nu}}{\alpha s^2} \partial_\perp^2 U^\dagger] e^{i\frac{p_\perp^2}{\alpha s} y_+} | y_\perp \rangle^{ab}, \end{aligned}$$

где $\partial_\perp^2 \equiv -\partial_i \partial^i$; U^{ab} – оператор линии Вильсона в присоединенном представлении. Здесь и далее мы используем швингеровские обозначения:

$$\begin{aligned} (x | F(p) | y) &\equiv \int \frac{d^D p}{(2\pi)^{D/2}} F(p) e^{-ip(x-y)}; \\ (x_\perp | F(p_\perp) | y_\perp) &\equiv \int \frac{d^{D-2} p}{(2\pi)^{(D-2)/2}} F(p_\perp) e^{i(p, x-y)_\perp}. \end{aligned}$$

Диаграмма (рис. 14, а) дает вклад

$$\begin{aligned} g^2 \left\{ \int_0^\infty du \int_{-\infty}^0 dv A_-^a(up^{\eta_1} + x_\perp) A_-^b(vp^{\eta_1} + y_\perp) \right\}_{\text{рис. 14, а}} &= \\ = -2\alpha_s \int_{e^{-\eta_2}}^\infty \frac{d\alpha}{\alpha} (x_\perp | \frac{1}{p_\perp^2 + \alpha^2 e^{-2\eta_1 s}} \partial_\perp^2 U^{ab} \frac{1}{p_\perp^2 + \alpha^2 e^{-2\eta_1 s}} | y_\perp) \end{aligned}$$

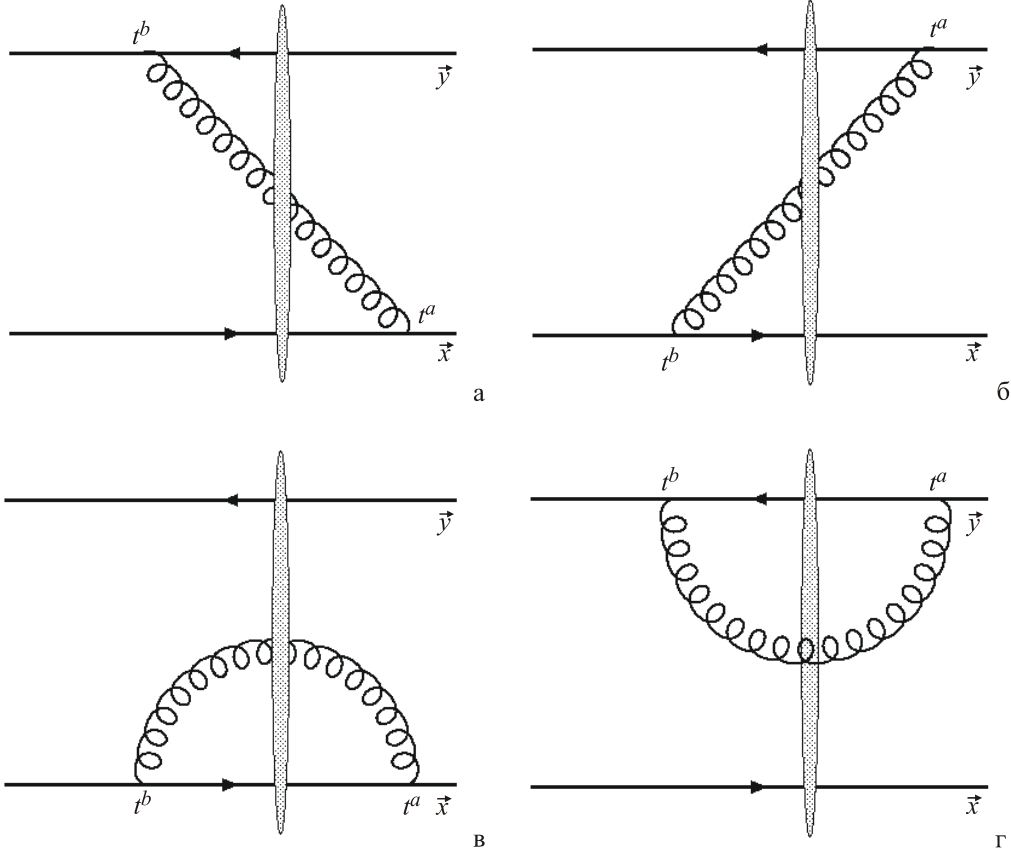


Рис. 14. Ведущие диаграммы для эволюции цветового диполя по быстрой (темный овал обозначает классическое глюонное поле мишени)

Формально интеграл по α расходится на нижнем пределе, но так как мы интегрируем по быстротам $\eta > \eta_2$, то в ГЛП получаем:

$$\begin{aligned} g^2 \left\{ \int_0^\infty du \int_{-\infty}^0 dv A_-^a (up^{\eta_1} + x_\perp) A_-^b (vp^{\eta_1} + y_\perp) \right\}_{\text{рис. 14, а}} = \\ = -2\alpha_s \Delta\eta (x_\perp | \frac{1}{p_\perp^2} \partial_\perp^2 U^{ab} \frac{1}{p_\perp^2} | y_\perp) = \\ = -2\alpha_s \Delta\eta \int d^2 z_\perp (x_\perp | \frac{p_i}{p_\perp^2} | z_\perp) \times \\ \times (2U_z - U_x - U_y)^{ab} (z_\perp | \frac{p_i}{p_\perp^2} | y_\perp) \end{aligned} \quad (36)$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} [U_x \otimes U_y^\dagger]^{\eta_1}_{\text{рис. 14, а}} = -\frac{\alpha_s}{2\pi^2} [t^a U_x \otimes t^b U_y^\dagger]^{\eta_2} \times \\ \times \int d^2 z_\perp \frac{(x-z, y-z)_\perp}{(x-z)_\perp^2 (y-z)_\perp^2} (2U_z^{\eta_2} - U_x^{\eta_2} - U_y^{\eta_2})^{ab} \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь $U(x_\perp) \equiv U_x$ и $[U_x \otimes U_y^\dagger]$ обозначает прямое произведение операторов в цветовом пространстве. Вклад диаграммы, изображенной на рис. 14, б, получается из (37) заменой $t^a U_x \otimes t^b U_y^\dagger \rightarrow U_x t^b \otimes U_y^\dagger t^a$ и $x \leftrightarrow y$. Вклад следующих двух диаграмм получается из (36), если положить $y = x$ (рис. 14, в) и $x = y$ (рис. 14, г). Окончательный ответ следующий:

$$\begin{aligned} [U_x \otimes U_y^\dagger]^{\eta_1} = -\frac{\alpha_s \Delta\eta}{2\pi^2} [t^a U_x \otimes t^b U_y^\dagger + \\ + U_x t^b \otimes U_y^\dagger t^a]^{\eta_2} \int d^2 z_\perp \frac{(x-z, y-z)_\perp}{(x-z)_\perp^2 (y-z)_\perp^2} \times \\ \times (2U_z^{\eta_2} - U_x^{\eta_2} - U_y^{\eta_2})^{ab} + \frac{\alpha_s \Delta\eta}{\pi^2} [t^a U_x t^b \otimes U_y^\dagger]^{\eta_2} \times \\ \times \int \frac{d^2 z_\perp}{(x-z)_\perp^2} (U_z^{\eta_2} - U_x^{\eta_2})^{ab} + \frac{\alpha_s \Delta\eta}{\pi^2} [U_x \otimes t^b U_y^\dagger t^a]^{\eta_2} \times \\ \times \int \frac{d^2 z_\perp}{(y-z)_\perp^2} (U_z^{\eta_2} - U_y^{\eta_2})^{ab}. \end{aligned}$$

Отсюда с помощью цветовой алгебры для оператора цветового диполя (35) получается уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{xy}}{\partial \eta} = \frac{\alpha_s N_c}{2\pi^2} \int d^2 z_\perp \frac{(x-y)_\perp^2}{(x-z)_\perp^2 (z-y)_\perp^2} \times \\ \times [N_{xz} + N_{zy} - N_{xy} + N_{xz} N_{zy}], \end{aligned} \quad (37)$$

где $N_{xy} \equiv N^\eta(x_\perp, y_\perp) = 1 - S^\eta(x_\perp, y_\perp)$. Если при усреднении (37) по состоянию мишени заменить среднее значение от произведения операторов $N_{xz} N_{zy}$ на произведение средних значений операторов N_{xz} и N_{zy} , то получаем замкнутое уравнение для амплитуды рас-

сеяния диполя в пространстве прицельных параметров. Это уравнение называется уравнением ВК (Балицкого – Ковчегова).

Эффекты большой плотности в дипольной картине. Уравнение ВК было получено Ю. Ковчеговым [85] в дипольной картине с использованием производящего функционала для цветовых диполей (26). В работе рассматривалась амплитуда рассеяния диполя на большом ($A \gg 1$) ядре. Полное выражение для нее определяется сверткой по прицельному параметру и размеру каждого из «вторичных» диполей:

$$\begin{aligned} N(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0, Y) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[\int \Phi^{(k)}(\vec{x}_{01}, Y, \vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k, \vec{x}_k) \times \right. \\ \left. \times \prod_{j=1}^k \gamma(\vec{x}_j, \vec{b}_j) d^2 x_j d^2 b_j \right], \end{aligned} \quad (38)$$

где дифференциальное число «вторичных» диполей связано с производящим функционалом

$$\begin{aligned} \Phi^{(k)}(\vec{x}_{01}, Y, \vec{b}_1 - \vec{b}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{b}_k - \vec{b}_0, \vec{x}_k) = \\ = \prod_{j=1}^k \frac{\delta}{\delta u(\vec{b}_j, \vec{x}_j)} Z(\vec{b}_0, \vec{x}_{01}, Y, u) \Big|_{u=1}. \end{aligned}$$

Факториал в формуле (38) связан с тождественностью диполей. Свертка дифференциального числа диполей с пропагаторами $\gamma(\vec{x}_j, \vec{b}_j)$ диполя в ядре описывает механизм взаимодействия диполя с ядром. При выводе уравнения эволюции для N конкретный вид этого взаимодействия (т. е. форма пропагатора [86] $\gamma(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0)$ пары $q\bar{q}$ в ядре) не существен. Его можно представить как обмен двумя глюонами (рис. 15, а).

Дальнейший вывод основан на преобразовании уравнения (26) к уравнению на дифференциальное число диполей $\Phi^{(k)}$ и, в конечном счете, на $N(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0, Y)$. В результате получается уравнение:

$$\begin{aligned} N(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0, Y) = -\gamma(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0) \exp \left[-\frac{4\alpha_s C_F}{\pi} \ln \left(\frac{x_{01}}{\rho} \right) Y \right] + \\ + \frac{\alpha_s C_F}{\pi^2} \int_0^Y dy \int_{\rho} d^2 x_2 \frac{x_{01}^2}{x_{02}^2 x_{12}^2} \times \\ \times \exp \left[-\frac{4\alpha_s C_F}{\pi} \ln \left(\frac{x_{01}}{\rho} \right) (Y - y) \right] \times \\ \times \left(2N(\vec{x}_{02}, \vec{b}_0 + \frac{1}{2} \vec{x}_{12}, y) - N(\vec{x}_{02}, \vec{b}_0 + \frac{1}{2} \vec{x}_{12}, y) \times \right. \\ \left. \times N(\vec{x}_{12}, \vec{b}_0 - \frac{1}{2} \vec{x}_{20}, y) \right). \end{aligned} \quad (39)$$

Из этого уравнения видно, что пропагатор диполя в ядре $\gamma(\vec{x}_{01}, \vec{b}_0)$ имеет смысл начального условия для N при $Y=0$. При выводе (39) предполагалась независимость взаимодействия каждого из диполей с ядром. Она обеспечивается большим числом нуклонов A в ядре. Большое значение A позволяет учитывать только веерные диаграммы (рис. 15, б), пренебрегая подавленными по A вкладами «померонных петель» (рис. 15, в).

В работе [85] показано, что уравнение (39) в дважды логарифмическом пределе совпадает с уравнением GLR. При большом размере ядра R и малых $\ll R$ характерных размерах диполей можно в (39) пренебречь $\vec{x}_{12}$ и $\vec{x}_{02}$ по сравнению с b_0 . После этого, дифференцируя по Y и опуская зависимость от b_0 , приходим к уравнению ВК:

$$\frac{\partial N(\vec{x}_{01}, Y)}{\partial Y} = \frac{\alpha_s N_c}{2\pi^2} \int_{\rho} d^2 x_2 \frac{x_{01}^2}{x_{02}^2 x_{12}^2} (N(\vec{x}_{02}, Y) + N(\vec{x}_{21}, Y) - N(\vec{x}_{01}, Y) - N(\vec{x}_{02}, Y) N(\vec{x}_{21}, Y)).$$

Эффективное действие и подход ЛМWLК. В настоящее время интенсивно развивается подход, получивший название конденсата цветового стекла (CGC, от англ. Colour Glass Condensate). Он был инициирован работой Венугопалана и Мак-Леррана [87], получив продолжение и развитие в работах Джалилиан-Мартина, Ковнера, Вегерта [88], Леонидова и Янку [90; 91]. Общий обзор можно найти в работах [89; 92; 93].

В подходе CGC партонные составляющие быстрого налетающего адрона (ядра)

делятся по быстроте на жесткие и мягкие моды. Это достигается введением параметра Λ разделения по быстроте. Короткоживущие мягкие глюоны (по соотношению неопределенности $\tau \sim 1/\delta E \propto x$) испускаются «замороженными» (что и оправдывает термин «стекло») конфигурациями долгоживущих быстрых партонных квазиклассически, т. е. для их описания используются приближение Вайцзеккера – Вильямса и неабелев аналог уравнений Максвелла с классическими источниками:

$$\partial^\mu F_{\mu, \nu}^a + g f^{abc} A^{b\mu} F_{\mu, \nu}^c = J_\nu^a. \quad (40)$$

При этом предполагается, что цветовой ток J_ν^a жестких мод, стоящий в правой части уравнения (40), имеет только продольную светоконусную компоненту: $J_\nu^a(x) = \delta_{+\nu} \rho^a(x^-, \vec{x})$, при этом ρ^a не зависит от светоконусного «времени» x^+ . Распределение источников ρ^a описывается функционалом $W_Y[\rho]$, уравнение эволюции по быстроте Y для которого называется ЛМWLК уравнением. Впервые оно было выведено в работе [94].

В модели Мак-Леррана и Венугопалана [87] в качестве источников рассматривались валентные кварки налетающего ядра без учета корреляций между ними, т. е.

$$\langle \rho^a(\vec{x}) \rho^b(\vec{y}) \rangle = \delta^{ab} \delta^{(2)}(\vec{x} - \vec{y}) \frac{g^2 A}{2\pi R_A^2}.$$

При этом функционал $W[\rho]$ является гауссовским и не зависит от Y .

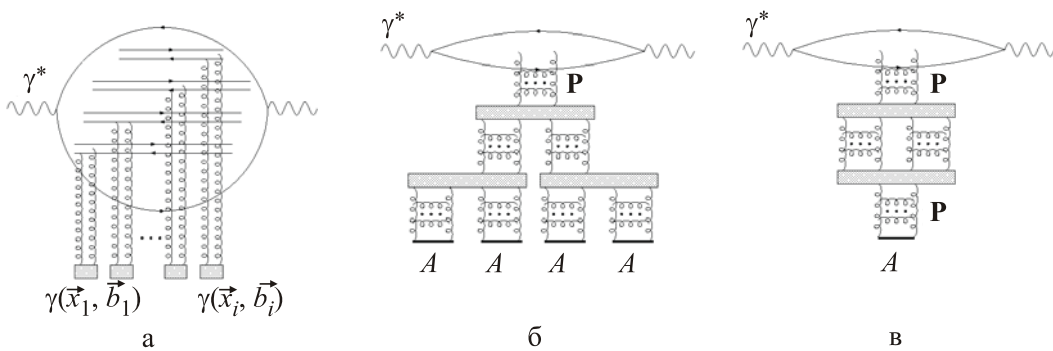


Рис. 15. Механизм взаимодействия диполя с ядром: а – глауберовский тип рассеяния диполей на ядре; б – веерные диаграммы, учитываемые уравнением ВК; в – подавленная по A диаграмма «померонной петли»

Модель с эйкональной формой квазиупругой S -матрицы

$$\hat{S} = P \exp \left[ig \int_{-\infty}^{\infty} \alpha_a(\vec{x}, x^+) \hat{\rho}^a(\vec{x}) dx^+ d^2x \right],$$

где $\alpha_a(\vec{x}, x^+) = A_{T,a}^-(\vec{x}, x^+)$ – эффективное поле партонов мишени T , является достаточно простой и в то же время позволяет получить JIMWLK уравнение. Вклад во взаимодействие между мишенью T и налетающей на нее частицей P дает только компонента A^- , поскольку, как уже упоминалось, цветовой ток партонов частицы P имеет только компоненту $J_+^a = \rho^a(\vec{x}, x^-)$. Поле α_a не зависит от продольной координаты x^- и отлично от нуля лишь в малом «временном» интервале около $x^+ = 0$ (поле ударной волны). Одним из главных допущений модели является замена квантового поля мишени на классическое поле $\alpha_a(\vec{x}, x^+)$, характеризующее статистическим весом $W[\alpha]$. Соответственно усреднение при вычислении элементов S -матрицы по квантовому состоянию мишени $|T\rangle$ заменяется на усреднение по всем классическим полевым конфигурациям с весом $W[\alpha]$:

$$\begin{aligned} & (\langle T | \otimes \langle P |) \hat{S} (| P \rangle \otimes | T \rangle) \rightarrow \\ & \rightarrow \int D\alpha W[\alpha] S[Y, \alpha], \quad S[Y, \alpha] = \langle P | \hat{S} | P \rangle. \end{aligned}$$

Основанием для классического рассмотрения поля мишени T служат большие квантовые числа заполнения при высоких энергиях и малых x , например для мишени T , представляющей собой ядро с большим $A \gg 1$ числом нуклонов. Величина $\rho^a(\vec{x}) = \rho^a(\vec{x}, x^- = 0) = \int \rho^a(\vec{x}, k^+) dk^+$ является оператором цветового тока партонов частицы P :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^a(\vec{x}, k^+) &= \hat{a}_{\vec{x}, k^+, b}^+ T_{bc}^a \hat{a}_{\vec{x}, k^+, c} + \hat{b}_{\vec{x}, k^+, i}^+ t_{ij}^a \hat{b}_{\vec{x}, k^+, j} - \\ &- \hat{c}_{\vec{x}, k^+, i}^+ t_{ji}^a \hat{c}_{\vec{x}, k^+, j}, \end{aligned}$$

где $\hat{a}^+$, $\hat{b}^+$ и $\hat{c}^+$ – операторы рождения глюонов, кварков и антикварков в частице P соответственно; $T_{bc}^a = -if^{abc}$ и t_{ij}^a – генераторы группы цветовой группы $SU(N_c)$. Эти операторы ρ^a удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям алгебры токов:

$$[\hat{\rho}^a(\vec{x}), \hat{\rho}^b(\vec{y})] = if^{abc} \delta(\vec{x} - \vec{y}) \hat{\rho}^c(\vec{x}).$$

Изменение быстроты с Y до $Y + \delta Y$ можно рассматривать как образование интервала быстрой, в который быстрые партоны частицы P испускают медленные глюоны. Изменение $S[Y, \alpha] = \langle P | \hat{S} | P \rangle$ происходит за счет поправки к вектору состояния частицы P . Уравнение эволюции

$$\frac{dS[Y, \alpha]}{dY} = \hat{H} S[Y, \alpha]$$

записывается через JIMWLK гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^2x d^2y d^2z K_{xy} \frac{\delta}{\delta \alpha^a(\vec{x})} [1 + \\ &+ V(\vec{x}) V^+(\vec{y}) - V(\vec{x}) V^+(\vec{z}) - V(\vec{z}) V^+(\vec{y})]_{ab} \frac{\delta}{\delta \alpha^b(\vec{y})}, \end{aligned} \quad (41)$$

в котором ядро

$$K_{xy} = \frac{(\vec{z} - \vec{y})(\vec{z} - \vec{x})}{(\vec{z} - \vec{y})^2 (\vec{z} - \vec{x})^2},$$

а $V(\vec{x})$ – оператор линии Вильсона. Для рассеянием синглетных по цвету объектов на величину $S[\alpha, Y]$ налагаются дополнительные ограничения

$$\int \frac{\delta S[Y, \alpha]}{\delta \alpha^a(\vec{x})} d^2x = 0, \quad \int V_{ba}^+(\vec{x}) \frac{\delta S[Y, \alpha]}{\delta \alpha^a(\vec{x})} d^2x = 0, \quad (42)$$

выражающие инвариантность $S[\alpha, Y]$ относительно вращений в цветовом пространстве. При условиях (42) гамильтониан (41) можно записать как

$$\begin{aligned} \hat{H}_d &= -\frac{1}{2(2\pi)^3} \int d^2x d^2y d^2z K_{xy}^d [1 + V(\vec{x}) V^+(\vec{y}) - \\ &- V(\vec{x}) V^+(\vec{z}) - V(\vec{z}) V^+(\vec{y})]_{ab} \frac{\delta^2}{\delta \alpha^a(\vec{x}) \delta \alpha^b(\vec{y})}, \end{aligned}$$

где величина K_{xy}^d представляет собой дипольное ядро:

$$K_{xy}^d = \frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{(\vec{z} - \vec{x})^2 (\vec{z} - \vec{y})^2}.$$

Для оператора $\hat{S} = 1 - N(\vec{x}, \vec{y}, Y) = \frac{1}{N_c} \text{Tr}(U^\dagger(\vec{y}) U(\vec{x}))$, представляющего цветовой диполь, это дает уравнение ВК.

Закключение

Приведенный обзор является довольно поверхностным и далеко не полным. Он может служить лишь введением в большой и интересный раздел физики больших энергий, называемый физикой малых x . Этот раздел приобретает все большее значение в связи с его применением как для описания результатов экспериментов по лептон-адронным (HERA), адрон-адронным (TEVATRON) и ядер-ядерным (RHIC) столкновениям, так и для составления физической программы и получения предсказаний для Большого адронного коллайдера (LHC).

Список литературы

1. Bogolyubov N. N., Struminsky B. V., Tavkhelidze A. N. On the Composite Models in Theories of Elementary Particles. Preprint JINR, Dubna. 1965. Vol. D-1968.
2. Tavkhelidze A. N. Higher symmetries and composite models of elementary particles // High Energy Physics and Elementary Particles, Lectures presented at Seminar Trieste, May 3 – June 30, 1965. Vienna, 1965. P. 753–762.
3. Bogolyubov N. N., Matveev V. A., Nguyen Van Hieu et al. Relativistic invariant equations for the composite particles and form factors // JINR preprint, Dubna. 1965. Vol. D-2075.
4. Han M., Nambu Y. Three Triplet Model with Double SU(3) Symmetry // Phys. Rev. B. 1965. Vol. 139.
5. Gell-Mann M. Quarks // Acta Phys. Austriaca Suppl. Phys. 1972. Vol. 9.
6. Adler S. L. Axial-vector vertex in spinor electrodynamics // Phys. Rev. 1969. Vol. 177.
7. Bell J. S., Jackiw R. A PCAC puzzle: in the sigma model // Nuovo Cim. A. 1969. Vol. 60.
8. Gross D. J., Wilczek F. Asymptotically Free Gauge Theories // Phys. Rev. D. 1973. Vol. 8.
9. Politzer H. D. Reliable Perturbative Results for Strong Interactions? // Phys. Rev. Lett. 1973. Vol. 30.
10. Bjorken J. D., Paschos E. A. Inelastic Electron Proton and gamma Proton Scattering, and the Structure of the Nucleon // Phys. Rev. 1969. Vol. 185.
11. Belavin A. et al. Pseudoparticle Solutions of the Yang-Mills Equations // Phys. Lett. B. 1975. Vol. 59.
12. Polyakov A. M. Quark Confinement and Topology of Gauge Groups // Nucl. Phys. B. 1977. Vol. 120.
13. Gribov V. N., Lipatov V. N. Deep inelastic $e p$ scattering in perturbation theory // Sov. J. Nucl. Phys. 1972. Vol. 15.
14. Lipatov L. N. The parton model and perturbation theory // Sov. J. Nucl. Phys. 1975. Vol. 20.
15. Altarelli G., Parisi G. Asymptotic Freedom in Parton Language // Nucl. Phys. B. 1977. Vol. 126.
16. Байер В. Н., Катков В. М., Фадин В. С. Излучение релятивистских электронов // М.: Атомиздат, 1973.
17. Fadin V. S., Kuraev E. A., Lipatov L. N. On the Pomeron Singularity in Asymptotically Free Theories // Phys. Lett. B. 1975. Vol. 60.
18. Kuraev E. A., Lipatov L. N., Fadin V. S. Multi-Reggeon Processes in the Yang-Mills Theory // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1976. Vol. 71.
19. Balitskii Ya. Ya., Lipatov L. N. The Pomeron Singularity in Quantum Chromodynamics // Sov. J. Nucl. Phys. 1978. Vol. 28.
20. Gell-Mann M., Goldberger M. L., Low F. E. et al. Elementary Particles of Conventional Field Theory as Regge Poles. III // Phys. Rev. B. 1964. Vol. 133.
21. Gribov V. N. Partial waves with complex orbital angular momenta and the asymptotic behavior of the scattering amplitude // Sov. Phys. JETP. 1962. Vol. 14.
22. Chew G. F., Frautschi S. C. Principle of Equivalence for all Strongly Interacting Particles within the S-Matrix Framework // Phys. Rev. Lett. 1961. Vol. 7.
23. Gribov V. N., Mur V. D., Kobzarev I. Y. et al. On the properties of amplitudes with logarithmically increasing interaction radius // Sov. J. Nucl. Phys. 1971. Vol. 13.
24. Lukaszuk L., Nicolescu B. Possible interpretation of pp rising total cross sections // Lett. Nuovo Cim. 1973. Vol. 8.
25. Лунатов Л. Н. Реджезация векторного мезона и вакуумная особенность в неабелевых калибровочных теориях // Ядерная физика. 1976. Т. 23.
26. Ter-Martirosyan K. A. Asymptotic behaviour of essentially inelastic collisions // Nucl. Phys. 1965. Vol. 68.
27. Fadin V. S. Multi-Reggeon Processes In QCD // Phys. Atom. Nucl. 2003. Vol. 66.

28. Фадин В. С. Реджевская траектория глюона в двухпетлевом приближении // Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma. 1995. Vol. 61.
29. Fadin V. S., Fiore R., Quartarolo A. Reggeization of the quark-quark scattering amplitude in QCD // Phys. Rev. D. 1996. Vol. 53.
30. Kotsky M. I., Fadin V. S. Reggeization of the amplitude of gluon-gluon scattering // Yad. Fiz. 1996. Vol. 59.
31. Fadin V. S., Fiore R., Kotsky M. I. Gluon Reggeization in QCD in the next-to-leading order // Phys. Lett. B. 1995. Vol. 359.
32. Fadin V. S., Fiore R., Kotsky M. I. Gluon Regge trajectory in the two loop approximation // Phys. Lett. B. 1996. Vol. 387.
33. Blumlein J., Ravindran V., Neerven W. L. van On the Gluon Regge Trajectory in // Phys. Rev. D. 1998. Vol. 58.
34. Del Duca V., Glover E. W. N. The High-energy limit of QCD at two loops // JHEP. 2001. Vol. 0110.
35. Балицкий Я. Я., Лунатов Л. Н., Фадин В. С. Реджевские процессы в неабелевых калибровочных теориях // Материалы IV зимней школы ЛИЯФ. Л., 1979.
36. Fadin V. S., Fiore R., Kozlov M. G. et al. Proof of the multi-Regge form of QCD amplitudes with gluon exchanges in the NLA // Phys. Lett. B. 2006. Vol. 639.
37. Fadin V. S., Fiore R. The Generalized nonforward BFKL equation and the 'bootstrap' condition for the gluon Reggeization in the NLLA // Phys. Lett. B. 1998. Vol. 440.
38. Fadin V. S., Lipatov L. N. Radiative corrections to QCD scattering amplitudes in a multi-Regge kinematics // Nucl. Phys. B. 1993. Vol. 406.
39. Fadin V. S., Fiore R., Quartarolo A. Quark contribution to the reggeon-reggeon-gluon vertex in QCD // Phys. Rev. D. 1994. Vol. 50.
40. Fadin V. S., Fiore R., Kotsky M. I. Gribov's theorem on soft emission and the reggeon-reggeon-gluon vertex at small transverse momentum // Phys. Lett. B. 1996. Vol. 389.
41. Del Duca V., Schmidt C. R. Virtual next-to-leading corrections to the Lipatov vertex // Phys. Rev. D. 1999. Vol. 59.
42. Fadin V. S., Fiore R., Papa A. One loop Reggeon-Reggeon gluon vertex at arbitrary space-time dimension // Phys. Rev. D. 2001. Vol. 63.
43. Fadin V. S., Fiore R., Flachi A., Kotsky M. I. Quark-antiquark contribution to the BFKL kernel // Phys. Lett. B. 1998. Vol. 422.
44. Fadin V. S., Kotsky M. I., Lipatov L. N. One-loop correction to the BFKL kernel from two gluon production // Phys. Lett. B. 1997. Vol. 415.
45. Fadin V. S., Lipatov L. N. BFKL pomeron in the next-to-leading approximation // Phys. Lett. B. 1998. Vol. 429.
46. Ciafaloni M., Camici G. Energy scale(s) and next-to-leading BFKL equation // Phys. Lett. B. 1998. Vol. 430.
47. Abt I. et al. Measurement of the proton structure function $F_2(x, Q^2)$ in the low x region at HERA // Nucl. Phys. B. 1993. Vol. 407.
48. Brodsky S. J., Fadin V. S., Kim V. T. et al. The QCD pomeron with optimal renormalization // JETP Lett. 1999. Vol. 70.
49. Brodsky S. J., Fadin V. S., Kim V. T. et al. High-energy QCD asymptotics of photon-photon collisions // JETP Lett. 2002. Vol. 76.
50. Brodsky S. J., Lepage G. P., Mackenzie P. B. On The Elimination Of Scale Ambiguities In Perturbative Quantum Chromodynamics // Phys. Rev. D. 1983. Vol. 28.
51. Ciafaloni M., Colferai D., Salam G. P. Renormalization group improved small x equation // Phys. Rev. D. 1999. Vol. 60.
52. Ciafaloni M., Colferai D. The BFKL equation at next-to-leading level and beyond // Phys. Lett. B. 1999. Vol. 452.
53. Ciafaloni M., Colferai D., Salam G. P., Stasto A. M. Renormalization group improved small x Green's function // Phys. Rev. D. 2003. Vol. 68.
54. Altarelli G., Ball R. D., Forte S. Resummation of singlet parton evolution at small x // Nucl. Phys. B. 2000. Vol. 575.
55. Altarelli G., Ball R. D., Forte S. Small x resummation and HERA structure function data // Nucl. Phys. B. 2001. Vol. 599.
56. Altarelli G., Ball R. D., Forte S. Factorization and resummation of small x scaling violations with running coupling // Nucl. Phys. B. 2002. Vol. 621.
57. Fadin V. S., Fiore R., Papa A. The Quark part of the nonforward BFKL kernel and the «bootstrap» for the gluon Reggeization // Phys. Rev. D. 1999. Vol. 60.

58. *Fadin V. S., Gorbachev D. A.* Non-forward colour octet BFKL kernel // *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 2000. Vol. 71.
59. *Fadin V. S., Fiore R.* Non-forward BFKL pomeron at next-to-leading order // *Phys. Lett. B.* 2005. Vol. 610.
60. *Gribov V. N.* The theory of complex angular momenta: Gribov lectures on theoretical physics / Ed. by P. Landshoff. Cambridge University Press, 2003.
61. *Bartels J., Wusthoff M.* The Triple Regge limit of diffractive dissociation in deep inelastic scattering // *Z. Phys. C.* 1995. Vol. 66.
62. *Bartels J., Lipatov L. N., Wusthoff M.* Conformal Invariance of the Transition Vertex $2 \rightarrow 4$ gluons // *Nucl. Phys. B.* 1996. Vol. 464.
63. *Bartels J., Lipatov L. N., Vacca G. P.* Interactions of reggeized gluons in the Mobius representation // *Nucl. Phys. B.* 2005. Vol. 706.
64. *Bartels J., Lipatov L. N., Salvatore M. et al.* Deformed spectral representation of the BFKL kernel and the bootstrap for gluon reggeization // *Nucl. Phys. B.* 2005. Vol. 726.
65. *Bartels J.* High-Energy Behavior in a Nonabelian Gauge Theory. 2. First Corrections to Beyond the Leading LNS Approximation // *Nucl. Phys. B.* 1980. Vol. 175.
66. *Kwiecinski J., Praszalowicz M.* Three Gluon Integral Equation And Odd C Singlet Regge Singularities In QCD // *Phys. Lett. B.* 1980. Vol. 94.
67. *Jaraszewicz T.* Infrared Divergences and Regge Behavior in QCD // *Acta Phys. Polon. B.* 1980. Vol. 11.
68. *Lipatov L. N.* High-energy asymptotics of multicolor QCD and exactly solvable lattice models // *JETP. Lett.* 1994. Vol. 59.
69. *Lipatov L. N.* Gauge invariant effective action for high-energy processes in QCD // *Nucl. Phys. B.* 1995. Vol. 452.
70. *Nikolaev N. N., Zakharov B. G.* Colour Transparency and Scaling Properties of Nuclear Shadowing in Deep Inelastic Scattering // *Z. Phys. C.* 1991. Vol. 49.
71. *Mueller A. H.* Soft gluons in the infinite momentum wave function and the BFKL pomeron // *Nucl. Phys. B.* 1994. Vol. 415.
72. *Nikolaev N. N., Zakharov B. G.* The triple-pomeron regime and structure function of the pomeron in diffractive deep inelastic scattering at very small x // *Z. Phys. C.* 1994. Vol. 64.
73. *Mueller A. H.* Unitarity and the BFKL pomeron // *Nucl. Phys. B.* 1995. Vol. 437.
74. *Lipatov L. N.* The Bare Pomeron In Quantum Chromodynamics // *Sov. Phys. JETP.* 1986. Vol. 63.
75. *Nikolaev N. N., Zakharov B. G., Zoller V. R.* The s channel approach to Lipatov's pomeron and hadronic cross-sections // *JETP Lett.* 1994. Vol. 59.
76. *Mueller A. H., Patel B.* Single and double BFKL pomeron exchange and a dipole picture of high-energy hard processes // *Nucl. Phys. B.* 1994. Vol. 425.
77. *Fadin V. S., Fiore R., Papa A.* On the coordinate representation of NLO BFKL // *Nucl. Phys. B.* 2007. Vol. 769.
78. *Balitsky I.* Quark contribution to the small- x evolution of color dipole // *Phys. Rev. D.* 2007. Vol. 75.
79. *Cheng H., Wu T. T.* Logarithmic factors in the high-energy behavior of quantum electrodynamics // *Phys. Rev. D.* 1970. Vol. 10.
80. *Gribov V. N., Lipatov L. N., Frolov G. V.* The leading singularity in the j plane in quantum electrodynamics // *Sov. J. Nucl. Phys.* 1971. Vol. 12.
81. *Fadin V. S., Fiore R., Grabovsky A. V. et al.* The dipole form of the gluon part of the BFKL kernel // *arXiv:0705.1885/hep-ph.*
82. *Gribov L. V., Levin E. M., Ryskin M. G.* Semihard Processes in QCD // *Phys. Rep.* 1983. Vol. 100.
83. *Balitsky I.* Operator expansion for high-energy scattering // *Nucl. Phys. B.* 1996. Vol. 463.
84. *Balitsky I.* High-Energy QCD and Wilson Lines // *arXiv:hep-ph/0101042*
85. *Kovchegov Y. V.* Small xF_2 structure function of a nucleus including multiple pomeron exchanges // *Phys. Rev. D.* 1999. Vol. 60.
86. *Kovchegov Y. V., Mueller A. H.* Gluon production in current nucleus and nucleon-nucleus collisions in a quasiclassical approximation // *Nucl. Phys. B.* 1998. Vol. 529.
87. *McLerran L., Venugopalan R.* Gluon distribution functions for very large nuclei at small transverse momentum // *Phys. Rev. D.* 1994. Vol. 49.
88. *Jalilian-Martin J., Kovner A., Weigert H.* The Wilson renormalization group for low x

physics: Gluon evolution at finite parton density // *Phys. Rev. D*. 1999. Vol. 59.

89. Леонидов А. В. Плотная глюонная материя в соударениях ядер // *УФН*. 2005. Т. 175, вып. 4.

90. Iancu E., Leonidov A., McLerran L. The Renormalization group equation for the color glass condensate // *Phys. Let. B*. 2001. Vol. 510.

91. Iancu E., Leonidov A., McLerran L. Nonlinear gluon evolution in the color glass condensate. 1 // *Nucl. Phys. A*. 2001. Vol. 692.

92. Iancu E., Venugopalan R. The Color Glass Condensate and High Energy Scattering in QCD // *Review for QGP3* / Eds. R. C. Hwa, X.-N. Wang. World Scientific, 2003.

93. Iancu E., Leonidov A., McLerran L. The Colour Glass Condensate: An Introduction // *QCD Perspectives on Hot and Dense Matter*, NATO Science Series, Kluwer. 2002.

94. Jalilian-Martin J., Kovner A., Leonidov A. et al. Wilson renormalization group for low x physics: Towards the high density regime // *Phys. Rev. D*. 1999. Vol. 59.

Материал поступил в редколлегию 08.10.2007

А. В. Довгаль¹, В. В. Козлов^{1,2}, А. М. Сорокин¹

¹ Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: am_sorokin@ngs.ru

ЛОКАЛЬНЫЕ И ГЛОБАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НЕУСТОЙЧИВОСТИ ТЕЧЕНИЙ С ОТРЫВОМ ЛАМИНАРНОГО ПОТОКА *

Обсуждается гидродинамическая неустойчивость течений с местными областями отрыва ламинарного потока (пограничного слоя). Результатами исследований, выполненных в последние годы, утверждается представление об отрывных течениях, сочетающих качественно различные свойства неустойчивости: усиление проникающих в зону отрыва внешних возмущений и генерацию самоподдерживающихся колебаний.

Ключевые слова: отрыв потока, гидродинамическая неустойчивость, переход к турбулентности, вихреобразование, управление отрывом.

В различных задачах аэрогидродинамики широко распространены течения с местными областями отрыва ламинарного пограничного слоя. Обозначаемые многими авторами как «отрывные пузыри» подобные течения могут возникать при обтекании гладкой поверхности (на аэродинамических профилях, крыльях, в диффузорах), вблизи выступов, уступов поверхности и прочих элементов ее неоднородности. Как правило, протяженность отрывных пузырей мала по сравнению с размером обтекаемого тела и зона отрыва сама по себе не вносит больших изменений в общую картину течения. Вместе с тем уже при малых числах Рейнольдса отрыв ламинарного потока сопровождается развитием нестационарного движения в пристенной зоне течения и его переходом в турбулентное состояние, что оказывает существенное влияние на локальные и интегральные аэродинамические характеристики тела, находящегося в потоке жидкости или газа.

Многолетний исследовательский интерес к течениям рассматриваемого класса во многом объясняется их фундаментальным свойством гидродинамической неустойчивости. Ниже обсуждается современное положение дел в ее изучении и возможное применение

полученных знаний к управлению отрывом. Теоретические и экспериментальные данные по этой тематике в основном получены при низких дозвуковых скоростях потока.

Модель переходных областей отрыва потока

Результатом ранних экспериментальных работ, посвященных местным зонам отрыва ламинарного потока, явилась модель течения, в которой формирование отрывной области определяется процессом ламинарно-турбулентного перехода. Упрощенная схема такого в среднем двумерного течения показана на рис. 1, более детально структура переходных областей отрыва отражена, например, в работах [1–3]. Внешние по отношению к зоне отрыва возмущения (турбулентные пульсации потока, акустические волны, вибрации обтекаемой поверхности) генерируют собственные колебания оторвавшегося слоя сдвига – волны неустойчивости. Нарастая в направлении потока, они проходят линейную и нелинейную стадии развития, приводя в итоге к турбулизации оторвавшегося пограничного слоя и его присоединению к поверхности тела.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Рособразования (проект РНП 2.1.2.3370 «Развитие научного потенциала высшей школы») и РФФИ (проект № 05-01-00034).

В этой модели зона отрыва выступает в роли усилителя внешних возмущений подобно другим конвективно неустойчивым сдвиговым течениям. К настоящему времени такое представление о местных областях отрыва потока обосновано результатами экспериментальных, теоретических исследований и прямого численного моделирования (см. ссылки на оригинальные работы в монографии [4]). Характеристики нарастающих в отрывной области колебаний определяются локальными свойствами течения и при малых амплитудах возмущений хорошо предсказываются линейной теорией гидродинамической устойчивости, развитой для пристенных и свободных пограничных слоев.

Глобальная динамика отрывных течений

В ряде случаев наряду с переходом к мелкомасштабной турбулентности отрыв ламинарного потока индуцирует крупномасштабное квазипериодическое движение, определяемое как «сход вихрей», или «взрыв отрывного пузыря». Подобное явление наблюдается в экспериментах на аэродинамических профилях, за достаточно большими неоднородностями обтекаемой поверхности, и получено прямым численным моделированием отрывных течений (рис. 2).

Одно из объяснений механизма возникновения крупномасштабных вихрей вписывается в рассмотренную выше модель переходных отрывных пузырей. В этом случае источником вихревого движения считается неустойчивость оторвавшегося слоя, в котором происходит усиление и взаимодействие возмущений завихренности с возрастанием их размера по мере распространения вниз по потоку [6–9]. Иной взгляд на данное явление заключается в том, что в его основе лежат не локальные, а глобальные свойства устойчивости течения в масштабе всей отрывной зоны. Принципиальное отличие когерентного вихреобразования от нарастания возмущений оторвавшегося слоя сдвига было отмечено авторами работы [5], которые объяснили происхождение квазипериодических вихрей свойственной отрывной зоне «неустойчивостью к сходу вихрей».

Подтверждение этой точки зрения было получено в работах [10; 11] при исследовании течения с отрывом пограничного слоя

за уступом поверхности плоской пластины. В экспериментах, выполненных при низком уровне фоновых возмущений в рабочей части аэродинамической трубы, удалось проследить совместное развитие волн неустойчивости сдвигового течения и колебаний на частоте образования крупномасштабных вихрей, по ряду признаков имевших независимое происхождение. В спектре пульсаций волны неустойчивости оторвавшегося слоя и возмущения, соответствующие сходу вихрей, предстают в виде волновых пакетов, разнесенных по частоте колебаний (рис. 3).

Существенное различие между высокочастотными возмущениями оторвавшегося слоя и низкочастотными пульсациями зоны отрыва в условиях генерации крупномасштабных вихрей иллюстрируется фазовыми характеристиками колебаний на рис. 4. Волны неустойчивости представляют собой конвективные (сносовые) возмущения, распространяющиеся в направлении потока, тогда как колебания на частоте вихреобразования таковыми не являются: их фаза растет вниз по потоку в области циркуляции, монотон-

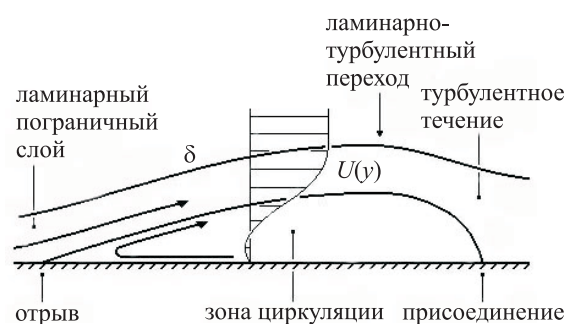


Рис. 1. Схема течения в переходной зоне отрыва пограничного слоя

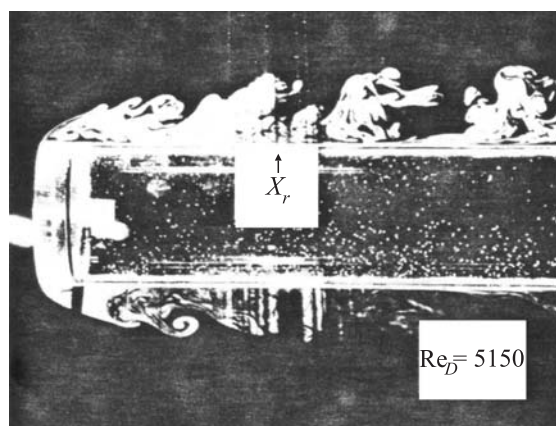


Рис. 2. Образование крупномасштабных вихрей при отрыве пограничного слоя на продольно обтекаемом цилиндре (визуализация течения из работы [5])

но убывая во внешней части оторвавшегося слоя. В отличие от волн неустойчивости, характеристики которых определяются локаль-

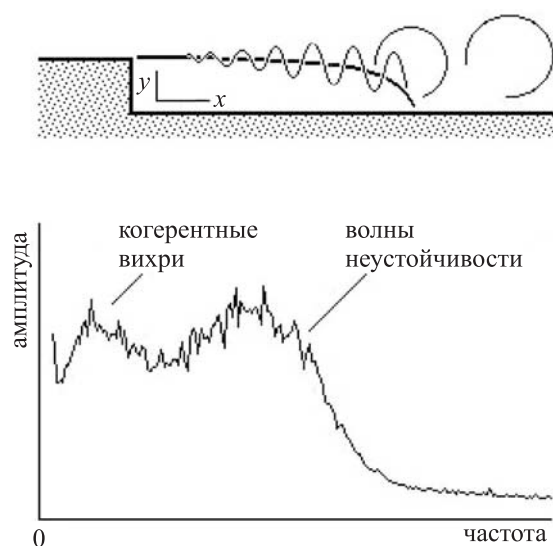


Рис. 3. Спектр пульсаций в зоне отрыва ламинарного пограничного слоя за двумерным уступом поверхности продольно обтекаемой пластины [10]

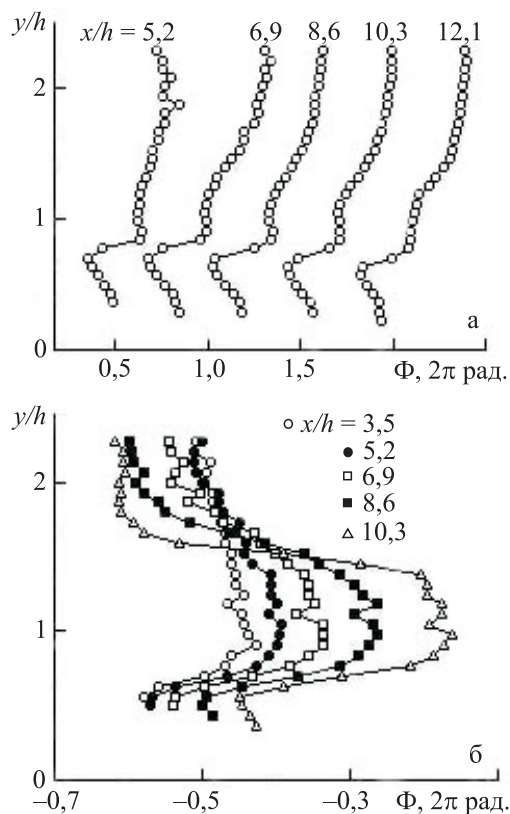


Рис. 4. Фазовые распределения волн неустойчивости (а) и колебаний на частоте схода вихрей (б) в начальном участке зоны отрыва пограничного слоя за двумерным уступом поверхности продольно обтекаемой пластины [11]; расстояние от стенки y и продольная координата x нормированы на высоту уступа h

ными свойствами течения, колебания на частоте схода вихрей отражают динамику всей зоны отрыва.

Согласно результатам расчетных работ последнего времени, переход от стационарного режима отрывного обтекания тел к когерентному вихреобразованию происходит с ростом основных параметров течения [12; 13]. В теоретических исследованиях к объяснению возникновения крупномасштабного вихревого движения при отрыве пограничного слоя привлекается концепция локальной абсолютной неустойчивости [14]. Данные расчетов предсказывают смену неустойчивости с конвективной на абсолютную при достаточно большой скорости возвратного течения в глубине зоны отрыва [15–17], что может повлечь развитие глобальных мод колебаний. В результате за точкой отрыва будет формироваться когерентное вихревое движение, возникающее безотносительно конвективных возмущений, проникающих в отрывную зону из набегающего потока. Представление о том, что явление схода вихрей выходит за рамки традиционной модели переходных отрывных пузырей, подтверждается результатами анализа глобальной устойчивости течения в местных областях отрыва потока [18; 19]. В этом отношении отрывные течения подобны другим гидродинамическим системам, в которых сочетается усиление внешнего шума и генерация автоколебаний.

Управление неустойчивым течением в местных областях отрыва потока

Обширная тема многолетних исследований – поиск новых методов модификации средних во времени и пульсационных характеристик отрывных течений. При отрыве ламинарного потока, в условиях сильной неустойчивости течения и его глобального отклика на внесенные в зону отрыва возмущения, результат управления может быть получен контролирующими воздействиями слабой интенсивности. В полной мере это проявляется при управлении крупномасштабным отрывом потока, например при его срыве с передней кромки крыла, расположенного под большим углом атаки. Результаты работ по этой тематике обсуждаются в монографии [20] и обзорных статьях [21; 22].

Аналогично ряд возможных методов управления характеристиками течения в местных отрывных зонах опирается на

рассмотренные выше свойства их гидродинамической неустойчивости.

Модификация среднего поля скорости. В традиционной модели переходных областей отрыва средние во времени характеристики течения связаны с процессом турбулизации оторвавшегося пограничного слоя. Соответственно, влияя тем или иным способом на развитие волн неустойчивости, удастся, как правило, сократить размеры отрывной зоны. Это достигается изменениями начального спектра нарастающих за точкой отрыва пульсаций и локальных свойств устойчивости течения. В первом случае могут быть использованы внешние периодические воздействия на зону отрыва, например акустическое [23; 24], во втором – охлаждение обтекаемой поверхности и отсасывание пристенного течения [25–27].

Управление когерентным вихревым движением. В режиме крупномасштабного вихреобразования представляет интерес управление зарождением и динамикой энергонесущих вихревых структур, определяющих свойства течения на участке присоединения оторвавшегося слоя и ниже по потоку отрывной зоны. Эффективным средством модификации вихревого движения, вызванного неустойчивостью оторвавшегося пограничного слоя, оказываются внешние гармонические воздействия на отрывное течение, регулирующие формирование и взаимодействие вихревых структур [5; 28; 29]. При этом изменения в пульсационной составляющей течения сказываются и на его средних во времени характеристиках, соответствующая вихревая модель предложена в работе [30].

Возможности управления сходом вихрей, инициированных развитием самоподдерживающихся колебаний отрывного течения, были рассмотрены в экспериментах [31; 32]. Опробованные методы воздействия на отрывную зону сводились к искусственному сокращению ее размеров, что должно было повлечь уменьшение вклада глобальных мод колебаний в поле течения. С этой целью применялись генерация высокочастотных волн неустойчивости оторвавшегося слоя [31] и отсасывание пристенного течения на участке его присоединения к обтекаемой потоком поверхности [32]. В обоих случаях были отмечены существенные изменения вихревого движения. Возбуждение высокочастотных нарастающих колебаний оторвавшегося

слоя удаленным акустическим источником и локально через поперечную щель в поверхности экспериментальной модели приводило к одному и тому же результату: более раннему формированию вихревых структур и уменьшению их интенсивности за участком присоединения потока (рис. 5). Отсасывание пограничного слоя сопровождалось значительным подавлением крупномасштабных вихрей в присоединяющемся течении (рис. 6).

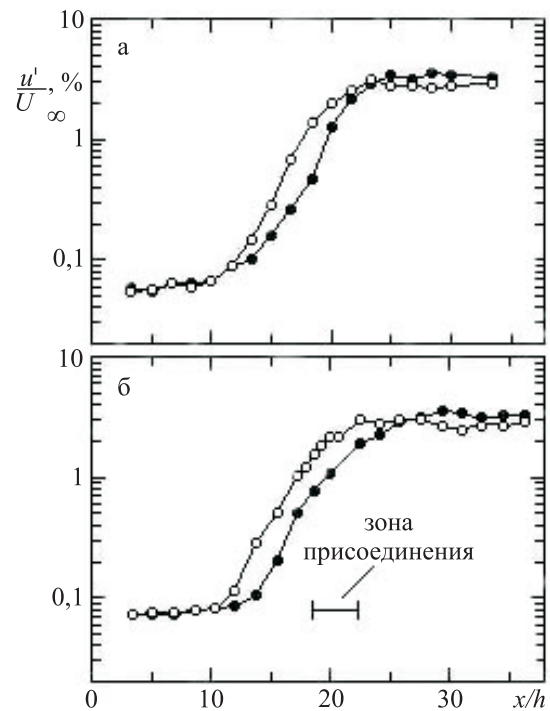


Рис. 5. Изменение максимальной амплитуды колебаний на частоте схода вихрей при отрыве пограничного слоя за двумерным уступом поверхности продольно обтекаемой пластины в условиях акустической (а) и локальной (б) генерации волн неустойчивости, невозмущенное (●) и управляемое (○) течения [31]

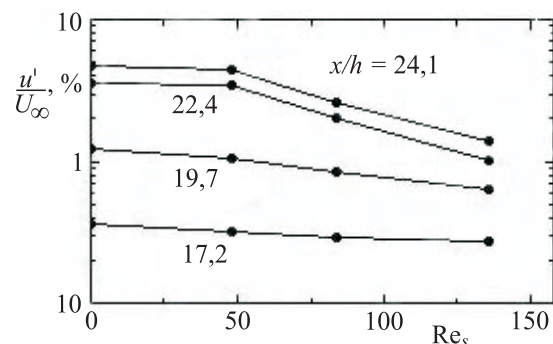


Рис. 6. Изменение максимальной амплитуды колебаний на частоте схода вихрей при отрыве пограничного слоя за двумерным уступом поверхности продольно обтекаемой пластины с интенсивностью отсасывания пристенного течения [32]

Заключение

Изложенные выше результаты не охватывают многие «частные» в контексте настоящей статьи эффекты неустойчивости течений с местными областями отрыва потока. Предмет продолжающихся теоретических и экспериментальных работ – формирование отрывных течений в условиях конкуренции их локальных и глобальных свойств неустойчивости. В результате складывается уточненная физическая модель явления отрыва потока, в конечном счете необходимая для максимально точного предсказания характеристик отрывных течений и разработки эффективных методов управления ими.

Список литературы

1. Horton H. P. A semi-empirical theory for the growth and bursting of laminar separation bubbles. Aeronaut. Research Council CP 1073, 1967.
2. Ward J. W. The behaviour and effects of laminar separation bubbles on airfoils in incompressible flow // Journ. of the Royal Aeronaut. Soc. 1963. Vol. 67. P. 783–790.
3. Brendel M., Mueller T. J. Boundary-layer measurements on an airfoil at low Reynolds numbers // Journ. of Aircraft. 1988. Vol. 25. P. 612–617.
4. Бойко А. В., Грек Г. Р., Довгаль А. В. и др. Возникновение турбулентности в пристенных течениях. Новосибирск: Наука, 1999. 328 с.
5. Sigurdson L. W., Roshko A. The structure and control of a turbulent reattaching flow // Turbulence Management and Relaminarization / Eds. H. W. Liepmann, R. Narasimha. Berlin: Springer Verlag, 1988. P. 497–514.
6. Bestek H., Gruber K., Fasel H. Self-excited unsteadiness of laminar separation bubbles caused by natural transition // The Prediction and Exploitation of Separated Flow. Royal Aeronaut. Soc. L., 1989. P. 14.1–14.16.
7. Hasan M. A. Z. The flow over a backward-facing step under controlled perturbation: laminar separation // J. Fluid Mech. 1992. Vol. 238. P. 73–96.
8. Kiya M. Separation bubbles // Theoretical and Applied Mechanics / Eds. P. Germain, M. Piau, D. Caillerie. Elsevier Sci. Pub. B.V., 1989. P. 173–191.
9. Pauley L. L., Moin P., Reynolds W. C. The structure of two-dimensional separation // J. Fluid Mech. 1990. Vol. 220. P. 397–411.
10. Довгаль А. В., Сорокин А. М. Неустойчивость течения в зоне отрыва ламинарного пограничного слоя к сходу периодических вихрей // Теплофизика и аэромеханика. 2001. Т. 8, № 2. С. 189–197.
11. Довгаль А. В., Сорокин А. М. Экспериментальное моделирование периодического вихреобразования при отрыве течения за угступом поверхности // Теплофизика и аэромеханика. 2002. Т. 9, № 2. С. 193–200.
12. Dallmann U., Herberg Th., Gebing H. et al. Flow field diagnostics: topological flow changes and spatio-temporal flow structure // AIAA-95-0791. 1995.
13. Marquillie M., Ehrenstein U. On the onset of nonlinear oscillations in a separating boundary-layer flow // J. Fluid Mech. 2003. Vol. 490. P. 169–188.
14. Huerre P., Monkewitz P. A. Local and global instabilities in spatially developing flows // Annu. Rev. Fluid Mech. 1990. Vol. 22. P. 473–537.
15. Gaster M. Stability of velocity profiles with reverse flow // Instability, Transition and Turbulence / Eds. M. Y. Hussaini, A. Kumar, C. L. Street. Berlin: Springer Verlag, 1992. P. 212–215.
16. Hammond D. A., Redekopp L. G. Local and global instability properties of separation bubbles // Eur. J. Mech. B/Fluids. 1998. Vol. 17. No. 2. P. 145–164.
17. Alam M., Sandham N. D. Direct numerical simulation of «short» laminar separation bubbles with turbulent reattachment // J. Fluid Mech. 2000. Vol. 410. P. 1–28.
18. Theofilis V., Hein S., Dallmann U. On the origins of unsteadiness and three-dimensionality in a laminar separation bubble // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 2000. Vol. 358. P. 3229–3246.
19. Theofilis V. Advances in global linear instability analysis of nonparallel and three-dimensional flows // Progress in Aerospace Sciences. 2003. Vol. 39. P. 249–315.
20. Gad-el-Hak M. Flow control: Passive, active and reactive flow management. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
21. Greenblatt D., Wygnanski I. The control of flow separation by periodic excitation // Progr. Aerosp. Sci. 2000. Vol. 36. P. 487–545.
22. Занин Б. Ю., Зверков И. Д., Козлов В. В. и др. О новых методах управления дозвуковыми отрывными течениями // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2007. Т. 2, вып. 1. С. 10–18.

23. Довгаль А. В., Козлов В. В. Влияние акустических возмущений на структуру течения в пограничном слое с неблагоприятным градиентом давления // Изв. АН СССР. Сер. Механика жидкости и газа. 1983. № 2. С. 48–52.
24. Zaman K. B. M. Q., McKinzie D. J. Control of laminar separation over airfoils by acoustic excitation // AIAA J. 1991. Vol. 29. No. 7. P. 1075–1083.
25. Al-Maaitah A. A., Nayfeh A. H., Ragab S. A. Effect of wall cooling on the stability of compressible subsonic flows over smooth humps and backward-facing steps // Phys. Fluids A. 1990. Vol. 2. No. 3. P. 381–389.
26. Al-Maaitah A. A., Nayfeh A. H., Ragab S. A. Effect of suction on the stability of subsonic flows over smooth backward-facing steps // AIAA J. 1990. Vol. 28. No. 11. P. 1916–1924.
27. Hahn M., Pfenninger W. Prevention of transition over a backward step by suction // J. Aircraft. 1973. Vol. 10. No. 10. P. 618–622.
28. Kiya M., Mochizuki O., Tanaka H. et al. Control of a turbulent leading-edge separation bubble // Separated Flows and Jets. / Eds. V. V. Kozlov, A. V. Dovgal. Berlin: Springer Verlag, 1991. P. 647–656.
29. Рус Ф. В., Кегельман Дж. Т. Управление когерентными структурами в присоединяющихся ламинарных и турбулентных слоях смешения // Аэрокосм. техника. 1987. № 5. С. 137–146.
30. Kiya M., Shimizu M., Mochizuki O. et al. Active forcing of an axisymmetric leading-edge turbulent separation bubble // AIAA-93-3245. 1993.
31. Довгаль А. В., Сорокин А. М. Взаимодействие колебаний больших и малых масштабов при отрыве ламинарного пограничного слоя // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 4. С. 72–78.
32. Довгаль А. В., Сорокин А. М. Применение отсоса потока для управления сходом крупномасштабных вихрей при отрыве пограничного слоя // ПМТФ. 2006. Т. 47, № 4. С. 60–65.

Материал поступил в редколлегию 02.10.2007

А. М. Шевченко¹, А. С. Шмаков^{1,2}, И. Н. Кавун¹, В. И. Запрягаев¹

¹ Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: shevch@itam.nsc.ru

ГИПЕРЗВУКОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВИХРЕВОГО СЛЕДА ЗА КРЫЛОМ И ТЕЛОМ ВРАЩЕНИЯ СО СКАЧКОМ УПЛОТНЕНИЯ НА ВХОДЕ В МОДЕЛЬНЫЙ ВОЗДУХОЗАБОРНИК *

Представлены результаты экспериментального исследования гиперзвукового взаимодействия аэродинамического следа за крылом и телом вращения с модельным воздухозаборником типа трубки Пито. Модельный воздухозаборник представлял собой цилиндрический канал с острой передней кромкой. Эксперименты выполнены в гиперзвуковой аэродинамической трубе Т-326 ИТПМ СОРАН при числе Маха 6. Показано, что след за телом вращения и след за крылом являются возбудителями автоколебательного процесса, который характеризуется высоким уровнем пульсаций давления. При этом структура течения в области взаимодействия и количественные характеристики процесса (уровень пульсаций давления, частота первой гармоники) при взаимодействии воздухозаборника с вихревым следом слабо зависят от угла атаки крыла.

Ключевые слова: вихревой след, взаимодействие со скачком уплотнения, нестационарный процесс.

Введение

Исследование сверхзвукового вихревого течения в следе за крылом и его взаимодействие со скачками уплотнения различной конфигурации является одной из актуальных задач аэрогазодинамики. Помимо фундаментального интереса, эта проблема имеет важное прикладное значение. Хорошо известно, что при взаимодействии вихревой системы, образующейся в следе за крылом, с ударными волнами происходит существенное изменение газодинамической структуры течения, которое при определенных условиях сопровождается разрушением вихревой схемы, включая взрыв вихря. Это может приводить к неблагоприятным (а иногда катастрофическим) последствиям при эксплуатации летательного аппарата. С другой стороны, эффекты, реализующиеся при взаимодействии продольных вихрей с ударными волнами, могут быть использованы для управления процессами стабилизации пламени и создания новых способов интенсификации

смешения топлива с воздухом в камере сгорания двигателя.

Поэтому такой тип взаимодействия был и остается предметом многочисленных исследований. В пионерской работе [1] впервые наблюдалось взаимодействие вихревого шнура с системой ударных волн на входе в воздухозаборник сверхзвукового летательного аппарата. Впоследствии исследования в этом направлении были проведены в России, Франции, Германии и США [2–6]. Обзор результатов численных и экспериментальных исследований по взаимодействию сверхзвукового вихря с косым и прямым скачками уплотнения опубликован в [7].

Одной из важнейших характеристик процесса взаимодействия вихря с ударной волной является его сильная нестационарность [3–5]. Ее проявлением являются наблюдаемые в экспериментах пульсации газодинамических параметров течения, изменение структуры течения и размеров области взаимодействия. Однако экспериментальных данных с количественными оценками ха-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 06-01-00774).

рактических нестационарного процесса недостаточно. Особо следует отметить отсутствие численных и экспериментальных результатов для гиперзвуковых скоростей, что чрезвычайно важно для разработки перспективных летательных аппаратов (исключение катастрофических режимов работы гиперзвукового воздухозаборника и улучшение смещения в камере сгорания).

Поэтому в ИТПМ СО РАН были выполнены исследования гиперзвукового взаимодействия продольного концевых вихря, генерируемого прямым крылом, с модельным воздухозаборником типа трубки Пито [8; 9]. Этот воздухозаборник представлял собой цилиндрический канал с дросселем, на входе в который реализовывался прямой скачок уплотнения. Первоначально целью этих экспериментов было моделирование взаимодействия продольного вихря с прямым скачком уплотнения при числе Маха 6 и сравнение с результатами [5], полученными для числа Маха 2,49. В [8; 9] было показано, что в отличие от результатов работы [5], концевой вихрь является инициатором автоколебательного процесса характеристики которого (структура области взаимодействия, распределение давления вдоль канала воздухозаборника, спектральные характеристики пульсаций давления) слабо зависят от интенсивности вихря.

В связи с этим выполнено исследование, результаты которого обсуждаются в настоящей работе. Основной целью экспериментов было выявление основных особенностей, сходства и различия процессов гиперзвукового взаимодействия аэродинамического следа за крылом и телом вращения с модельным воздухозаборником типа трубки Пито.

Методика и техника исследований

Эксперименты были проведены в гиперзвуковой аэродинамической трубе Т-326 ИТПМ СО РАН, в которой реализуется истечение из круглого сопла в камеру Эйлера. Диапазон чисел Маха 6–14.

Воздухозаборник типа трубки Пито представляет собой цилиндрический канал с острой передней кромкой диаметром 30 мм и длиной 70 мм. Прямой скачок формируется перед воздухозаборником посредством регулируемого дросселя, представляющего собой подвижный усеченный конус. Для формирования вихревого поля течения на входе в воз-

духозаборник использовались две модели. Первая из них (рис. 1, а) представляет собой прямое полукрыло с симметричным ромбовидным профилем (генератор вихря). Хорда крыла составляла 40 мм, размах – 200 мм, толщина профиля – 4 мм. Крыло устанавливалось на пол камеры Эйлера на срезе сопла так, чтобы генерируемый вихрь находился примерно на оси симметрии. Угол атаки крыла мог варьироваться в диапазоне $\pm 30^\circ$. Вторая модель (рис. 1, б) предназначена для изучения течения в следе за телом вращения. Тело вращения представляло собой комбинацию «острый конус-цилиндр» с общей длиной 36 мм и диаметром 10 мм. Удлинение конической головной части составляло 1,8. Модель устанавливалась на пол камеры Эйлера под нулевым углом атаки. В первой серии экспериментов воздухозаборник располагался на расстоянии 118 мм вниз по потоку от задней кромки крыла, во второй – на расстоянии 139 мм вниз по потоку от заднего торца тела вращения.

В предварительных экспериментах было выполнено измерение поля полных давлений в следе за крылом и телом вращения. Использовалась трубка Пито с внешним диаметром 0,8 мм. В ходе экспериментов осуществлялась визуализация течения методом Теплера с использованием прибора ИАБ-451. Подсветка осуществлялась импульсным источником света с длительностью экспозиции 3 мкс. Теневые картины регистрировались монохромной видеокамерой с частотой записи 33 кадра в секунду. Для измерения пульсаций давления на торце дрос-

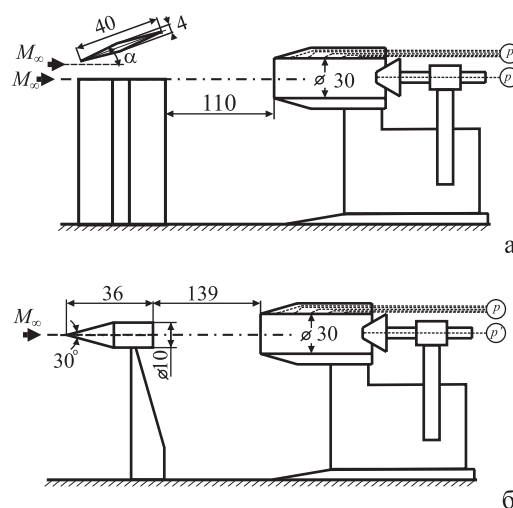
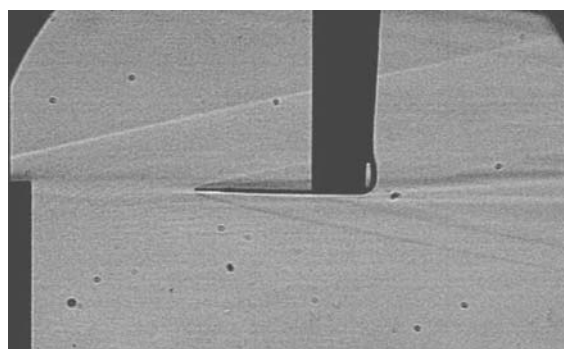
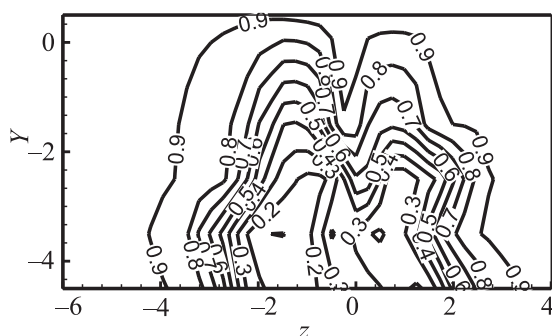


Рис. 1. Схема эксперимента: а – вихрь + воздухозаборник; б – след + воздухозаборник

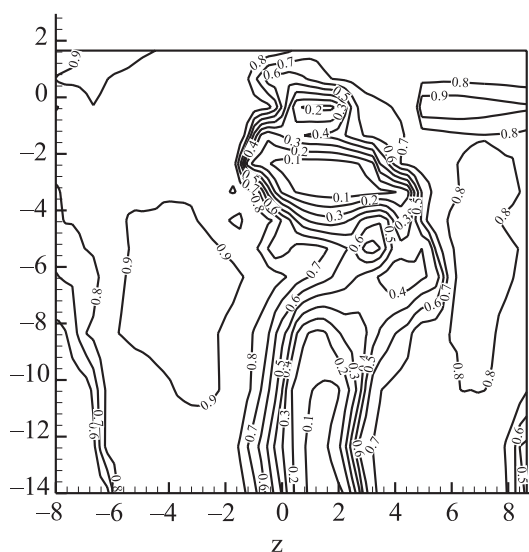
селя воздухозаборника использовался пьезометрический датчик пульсаций давления (см. рис. 1). Усиленный сигнал с пьезодатчика оцифровывался с помощью АЦП с частотой 100 кГц. Запись измерительного сигнала датчика пульсаций давления была синхронизована с покадровым вводом видеоизображений в ЭВМ. Кроме этого осуществлялось измерение распределения осредненного статического давления вдоль образующей канала воздухозаборника.



а



б



в

Рис. 2. Поле течения в следе за крылом:
а – теневая картина; изолинии давления Пито
при $\alpha = 0$ град (б) и $\alpha = 10$ град (в)

Эксперименты были проведены при числе Маха 6, полном давлении в форкамере 1,6 МПа, температуре торможения 390 ± 10 К. Эти условия соответствуют единичному числу Рейнольдса равному $11 \cdot 10^6$ 1/м. Экспериментальные данные получены для углов атаки крыла до 15° с шагом $2,5^\circ$.

Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены результаты экспериментов по изучению течения в следе за крылом и телом вращения соответственно. Как видно из теневых видеоизображений (рис. 2, а; 3, а), размер зонда Пито достаточно мал и не вызывает разрушение течения.

На рис. 2, а показана верхняя часть изолиний давления, измеренного трубкой Пито, в следе за крылом при нулевом угле атаки. Как видно, контуры давления почти симметричны относительно вертикальной плоскости и типичны для течения в следе при отсутствии сформировавшегося концевой вихря. На рис. 2, в представлены изолинии давления Пито в следе за крылом при угле атаки $\alpha = 10^\circ$ в сечении, расположенном на расстоянии 55 мм от задней кромки крыла. Сравнение результатов визуализации и зондирования течения показывает, что течение в следе за крылом и телом вращения характеризуется падением полного давления. Так, на рис. 2, в хорошо видны две области пониженного давления. Верхняя область с замкнутыми изолиниями соответствует ядру вихря, а нижняя – собственно следу за крылом. На рис. 3, б показаны изолинии давления Пито в следе за телом вращения. Эти данные были получены в сечении на расстоянии 35 мм вниз по потоку от заднего торца тела вращения. Верхняя область с практически круговыми контурами равного давления Пито соответствует следу за телом вращения, а небольшое искажение в нижней части вызвано наличием поддерживающего пилона. Следует отметить, что падение давления в следе за крылом больше, чем в следе за телом вращения. Полученные результаты являлись исходными данными для исследования взаимодействия следа за крылом и телом вращения с воздухозаборником типа трубки Пито.

На рис. 4 показаны типичные экспериментальные данные, полученные для воздухозаборника в невозмущенном потоке. Видно, что головной скачок на оси воздухозаборника

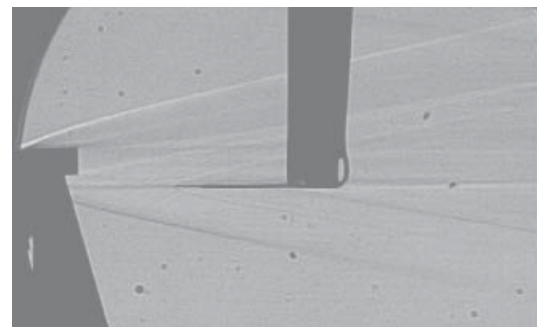
ка практически прямой (рис. 4, *а*), уровень пульсаций давления на торце дросселя не превышает 3 % от величины давления Пито (рис. 4, *б*). Спектральный анализ пульсаций давления выявил дискретные составляющие сравнительно малой мощности и с частотой первой гармоники 1 330 Гц (рис. 4, *в*). Эта частота примерно соответствует частоте четвертьволнового резонанса.

На рис. 5 показаны типичные результаты экспериментов по визуализации течения и измерения пульсаций давления при взаимодействии вихревого следа за крылом с воздухозаборником (в данном случае приведены данные для угла атаки крыла $\alpha = 10^\circ$). Видно, что структура течения перед воздухозаборником кардинально изменяется. Возникает автоколебательный режим взаимодействия. Анализ позволяет выявить следующие фазы этого процесса. Первая фаза соответствует движению волны сжатия внутри канала воздухозаборника от дросселя вверх по потоку. Начало этой фазы характеризуется максимальным уровнем давления на торце дросселя, которое в несколько раз превышает давление Пито, соответствующее невозмущенному потоку. Вторая фаза характеризуется движением ударной волны вверх против потока от передней кромки воздухозаборника к задней кромке крыла. За фронтом ударной волны наблюдается зона интенсивного вихревого движения. Эта фаза характеризуется падением давления на торце дросселя. Когда ударная волна достигает крыла, фиксируется минимум давления. Затем происходит разрушение фронта ударной волны и наблюдается снос завихренного течения вниз по потоку к каналу воздухозаборника. Эта фаза соответствует повышению давления на торце дросселя воздухозаборника. Существование автоколебательного режима подтверждается распределением спектральной плотности мощности пульсации давления. На рис. 5, *в* хорошо видны характерные пики, соответствующие основной и субгармоникам. Аналогичные результаты были получены для всех случаев взаимодействия следа за крылом с воздухозаборником ($\alpha = 0-15^\circ$).

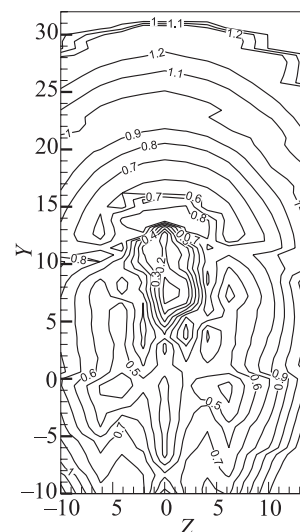
На рис. 6 представлены типичные теневые картины и результаты измерения пульсации давления, полученные при взаимодействии следа за телом вращения с воздухозаборником. Так же, как и в случае взаимодействия

следа за крылом с воздухозаборником, наблюдался автоколебательный процесс. При этом были выявлены и некоторые отличия. Во-первых, меньший уровень пульсации давления и, во-вторых, меньший масштаб распространения зоны взаимодействия вверх по потоку. Не было зарегистрировано ни одного случая, когда бы зона взаимодействия достигла тела вращения.

На рис. 7 и 8 соответственно представлены зависимости среднеквадратичных пульсаций давления и числа Струхала от угла атаки крыла. Число Струхала вычислялось по частоте первой гармоники и длине канала. Видно, что нельзя выделить никакой монотонной зависимости частоты первой гармоники от угла атаки крыла. Частота первой гармоники для случая взаимодействия воздухозаборника со следом за крылом практически в два раза меньше частоты четвертьволнового резонанса, характерной для воздухозаборника в невозмущенном потоке (см. рис. 8). С другой стороны, среднеквадратичные



а



б

Рис. 3. Поле течения в следе за телом вращения: *а* – теневая картина; *б* – изолинии давления Пито

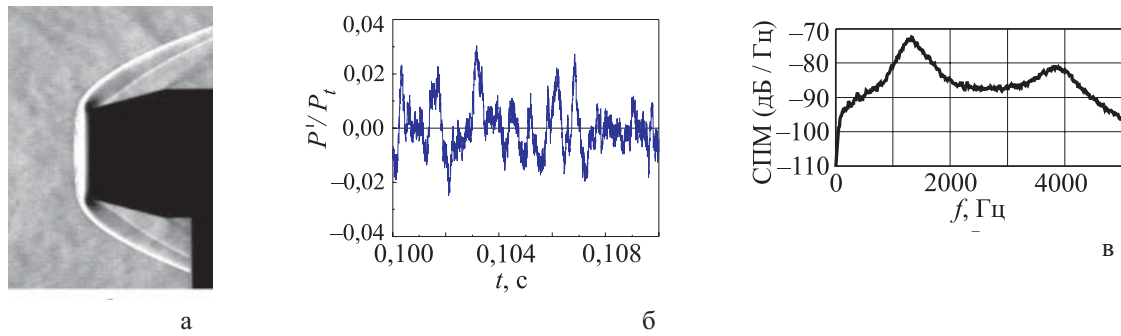


Рис. 4. Воздухозаборник в невозмущенном потоке: а – типичная теневая фотография; б – пульсации давления; в – распределения спектральной плотности мощности пульсаций

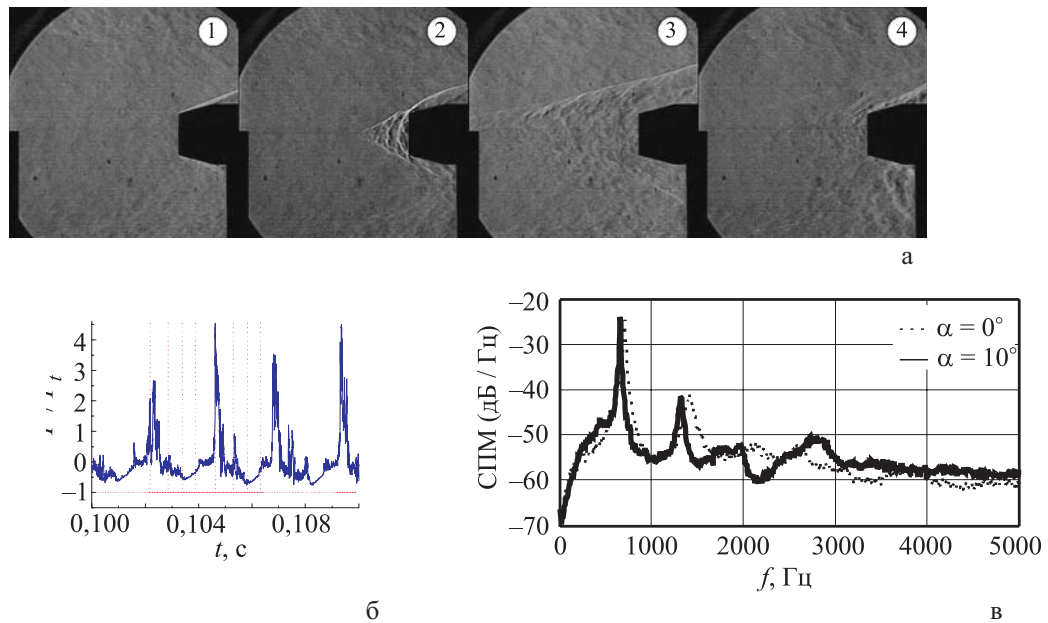


Рис. 5. Взаимодействие следа за крылом с воздухозаборником типа рубки Пито (угол атаки $\alpha = 10^\circ$): а – различные фазы взаимодействия следа за прямым полукрылом с воздухозаборником; б – пульсация давления; в – спектральная плотность мощности пульсации давления

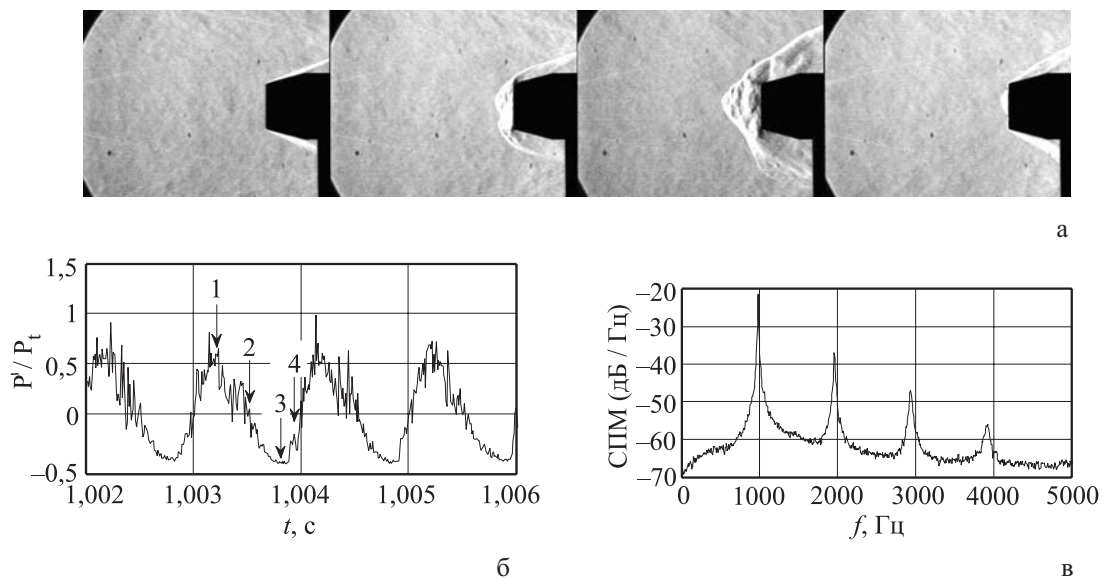


Рис. 6. Взаимодействие следа за телом вращения с воздухозаборником типа трубки Пито: а – различные фазы процесса взаимодействия следа за телом вращения с воздухозаборником; б – пульсация давления; в – спектральная плотность мощности пульсации давления

пульсации давления для случая взаимодействия крыла с воздухозаборником почти на два порядка больше, чем в случае воздухозаборника в невозмущенном потоке (см. рис. 7). Частота первой гармоники в случае взаимодействия следа за телом вращения с воздухозаборником значительно больше частоты, характерной для взаимодействия вихря с воздухозаборником, но в то же время значительно меньше частоты, характерной для воздухозаборника в невозмущенном потоке. Среднеквадратичные пульсации давления для обоих процессов взаимодействия были примерно одного порядка.

На рис. 9 представлено распределение статического давления вдоль канала воздухозаборника. Как и ожидалось, в случае взаимодействия вихря с воздухозаборником давление в канале меньше, чем в случае воздухозаборника в невозмущенном потоке. Но при этом нельзя установить какой-либо определенной зависимости между распределением давления вдоль канала и углом атаки крыла. В случае взаимодействия тела вращения с воздухозаборником давление в канале меньше, чем давление, измеренное в канале для случая «воздухозаборник в невозмущенном потоке», но больше, чем в случае взаимодействия вихря с воздухозаборником.

Таким образом, след за телом вращения, как и вихрь, является возбудителем автоколебательного процесса. Частота первой гармоники так же, как и давление вдоль канала воздухозаборника в случае взаимодействия тела вращения с воздухозаборником, несколько больше, чем в случае взаимодействия вихря с воздухозаборником.

По-видимому, наблюдаемый автоколебательный процесс вызван не особенностями взаимодействия вихревого следа со скачком уплотнения, а неоднородностью поля чисел Маха и полного давления на входе в воздухозаборник. Условия эксперимента, при которых наблюдались автоколебания, не противоречат критерию периферийного максимума, сформулированному для подобных конфигураций в работе [10]. Поэтому эксперименты по исследованию взаимодействия следа за крылом с модельным воздухозаборником типа трубки Пито не моделируют процесс взаимодействия продольного вихря со скачком уплотнения. Это другая задача, изучающая попадание вихревого следа в канал с дросселем.

Вполне возможно, что автоколебательный режим взаимодействия должен был наблюдаться и авторами работы [5]. Однако в цитируемой работе визуализация течения проводилась с частотой 2 кадра в секунду (при времени экспозиции 1 мкс), что, по-видимому, было не достаточно для анализа изменения картины течения во времени. Кроме этого, пульсация давления измерялась не на торце дросселя, а на приемной части зонда, установленного по оси канала выше по потоку от передней кромки воздухозаборника. Поэтому датчик давления в одни момен-

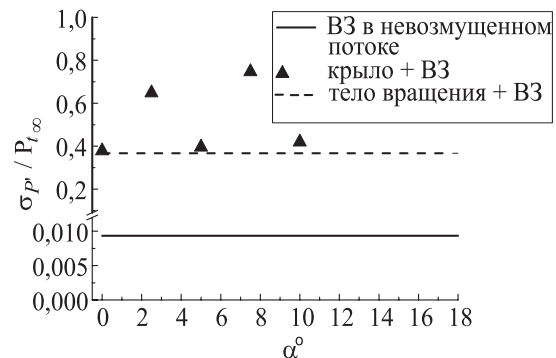


Рис. 7. Зависимость среднеквадратичных пульсаций давления от угла атаки

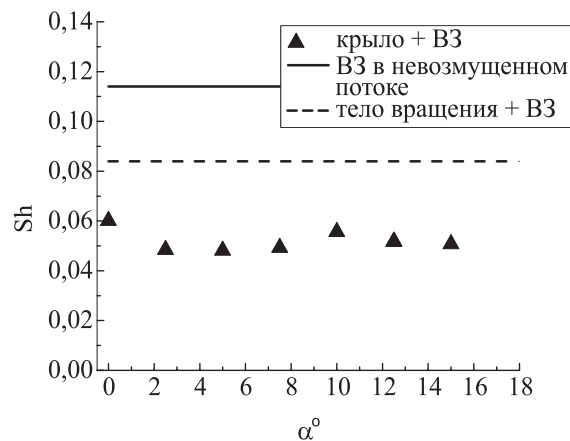


Рис. 8. Зависимость числа Струхала от угла атаки крыла

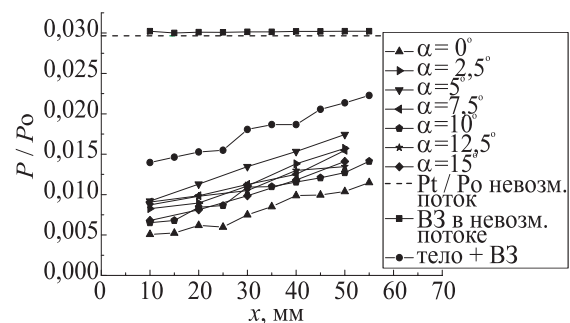


Рис. 9. Распределение давления вдоль канала воздухозаборника

ты времени (когда фронт ударной волны был впереди его) фиксировал мгновенные значения давления в области взаимодействия, а в другие (когда фронт ударной волны был сзади его приемной части) – давление в следе за крылом. Естественно, что уровни давления при этом отличались в несколько раз. Поэтому авторы работы [5] трактовали свои экспериментальные данные как бимодальный процесс взаимодействия.

Заключение

При числе Маха 6 выполнено экспериментальное исследование взаимодействия следа за крылом и телом вращения с модельным воздухозаборником типа трубки Пито. Показано, что след за телом вращения и след за крылом формируют начальное возмущение в потоке и инициируют автоколебательный процесс, который характеризуется высоким уровнем пульсации давления. Характеристики процесса взаимодействия воздухозаборника с вихревым следом за крылом слабо зависят от угла атаки крыла, а следовательно, и от интенсивности продольного вихря.

Список литературы

1. Затолока В. В., Иванюшкин А. К., Николаев А. В. Интерференция вихрей со скачками уплотнения в воздухозаборнике, разрушение вихрей // Учен. зап. ЦАГИ. 1975. Т. 6, № 5.
2. Delery J., Horowitz E., Leuchter O., Solignac J. Fundamental Studies on Vortex Flows // La Recherche Aerospatiale. (English ed.) 1984. P. 1–24.
3. Глотов Г. Ф. Интерференция вихревого шнура со скачками уплотнения в свободном

потоке и неизобарических струях // Учен. зап. ЦАГИ. 1989. Т. 20, № 5.

4. Иванюшкин А. К., Коротков Ю. В., Николаев А. В. Некоторые особенности интерференции скачков уплотнения с аэродинамическим следом за телом // Учен. зап. ЦАГИ. 1989. Т. 20, № 5.

5. Kalkhoran I. M., Smart M. K., Betti A. Interaction of a supersonic wing tip vortex with a normal shock // AIAA Journal. 1996. Vol. 3. No. 34. P. 1855–1861.

6. Боровой В. Я., Кубышина Т. В., Скуратов А. С., Яковлева Л. В. Вихрь в сверхзвуковом потоке и его влияние на обтекание и теплообмен затупленного тела // Механика жидкости и газа. 2000. № 5. С. 66–76.

7. Kalkhoran I. M., Smart M. K. Aspects of shock wave-induced vortex breakdown // Progress in Aerospace Sciences. 2000. Vol. 30. P. 63–95.

8. Shevchenko A. M., Kavun I. N., Pavlov A. A., Zapryagaev V. I. Review of ITAM experiments on shock / vortex interaction // European Conference for Aerospace Sciences. Moscow, July 4–7, 2005. Paper No. 2.07.01. P. 1–7.

9. Shevchenko A. M., Kavun I. N., Pavlov A. A., Zapryagaev V. I. Visualization of wing-tip vortices and of an unsteady flowfield in shock / vortex interaction // 12th Intern. Symp. on Flow Visualization. Gottingen, Germany, September 10–14, 2006. Paper No. 219. P. 1–10.

10. Демин В. С., Гапонов С. А. Условия возникновения автоколебаний в трубе при натекании на ее вход потока газа // Прикл. механика и техн. физика. 1994. Т. 35, № 6.

Материал поступил в редколлегию 12.10.2007

ОЦЕНКА СКОРОСТИ ЗАПОЛНЕНИЯ КОЛОНКИ С ЦЕНОСФЕРАМИ ГЕЛИЕМ

В статье представлен метод оценивания количества газа, проникшего в частицы, на основании анализа уравнений, описывающих многофазное движение смеси газов и твердых избирательно проницаемых частиц. Приводятся примеры расчета для конкретной колонки минимального времени заполнения колонки в зависимости от коэффициента проницаемости частиц.

Ключевые слова: пористый слой, механика многофазных сред, хроматографическая колонка, природный газ, гелий, обогащение.

Введение

Гелий имеет все большее практическое значение в науке и технике. К основным областям применения гелия относятся: космическая промышленность (где используется жидкий водород), области с взрывоопасными технологическими процессами, криогенная техника, плавка, резка и сварка металлов, водолазные работы, медицина (особенно в томографии), газовая хроматография, волоконно-оптическое производство, поиск мест утечки газа, порошковая металлургия и др. Также появляются новые направления использования этого газа, которые раньше считались убыточными, связанные с летательными аппаратами – воздушными шарами и дирижаблями. Гелий впервые был обнаружен на Солнце в 1868 г. П. Жансеном, на Земле же его присутствие было доказано лишь спустя 27 лет, причем в очень маленьком количестве в воздухе.

Основным способом его добычи является сжижение природного газа, содержащего гелий; состав природного газа следующий: метан (CH_4) до 98 %, пропан (C_3H_8), бутан (C_4H_{10}), водород (H_2), сероводород (H_2S), диоксид углерода (CO_2), азот (N_2), гелий (He).

Основную часть занимает метан, далее идут более высокие углеводороды и производные метана, и небольшую часть составляют неорганические вещества, в том числе гелий. Технология сжижения природного газа, вследствие наличия небольшого количества гелия, является очень энергоемкой, что упирается в огромные капиталовложения. Чтобы производство было выгодным,

количество гелия, добытого таким способом, должно окупить затраты на его охлаждение. Так, например, в США этот благородный газ не извлекается при его содержании меньше 0,5 % по массе. В России же извлечение происходит в основном из бедных месторождений с содержанием менее 0,1 % [1].

Добыча природного газа и разделение его на компоненты является важной проблемой, которая до сих пор испытывает недостаток в продуктивных методах реализации этого процесса. С другой стороны, наличие гелия и других неорганических веществ наносит ущерб горючим свойствам природного газа, что говорит о необходимости его извлечения.

В работах [2; 3] показана возможность использования ценосфер летучих зол в качестве мембран для фильтрации гелия. В работе [4] представлена математическая модель движения ценосфер (сферических избирательно проницаемых частиц) в смеси газов метана и гелия. С помощью численного моделирования показано адекватное описание исследуемого явления. К сожалению, численные методы предлагают решение только для конкретных условий эксперимента. Для понимания явления необходимо его исследовать на большем количестве начальных данных, что требует непосредственного анализа уравнений.

Получение решения нестационарной задачи прохождения гелия через хроматографическую колонку

В [4] представлены уравнения, описывающие движение смеси газов гелия и ме-

тана по колонке, заполненной ценосферами, на отрезке $0 \leq x \leq L$:

$$\rho_{21,t} = C_m (\rho_{11} - \rho_{21}) m_2, \quad (1)$$

$$\rho_{11,t} + (\rho_{11} v_1)_x = -C_m (\rho_{11} - \rho_{21}) m_2, \quad (2)$$

$$\rho_{12,t} + (\rho_{12} v_1)_x = 0,$$

$$(\rho_1 v_1)_t + (\rho_1 v_1^2 + P)_x =$$

$$= -C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} (\rho_{11} v_1 + \rho_{12} v_2) v_1.$$

Здесь

$$\rho_{11} = \frac{\rho_{11} R_1 T}{m_1}, \quad \rho_{21} = \frac{\rho_{21} R_1 T}{\beta^3 m_2}, \quad P = \rho_{11} R_1 T + \rho_{12} R_2 T,$$

$$m_1 + m_2 = 1, \quad \rho_1 = \rho_{11} + \rho_{12}.$$

Здесь ρ_{21} – плотность гелия, попавшего в частицы; ρ_{11} – плотность гелия вне частиц; ρ_{12} – плотность газа вне частиц, физические параметры которого существенно отличаются от параметров гелия; v_1 – скорость движения смеси; m_2 – объемная концентрация частиц; R_1, R_2 – газовые постоянные (индекс 1 соответствует гелию, 2 – другому газу); T – температура; v_1, v_2 – вязкости газов; R_+ – внешний радиус частиц.

Проинтегрируем уравнения (1) и (2) от 0 до L , умножив их предварительно на S – площадь сечения колонки, тогда получим следующие очевидные соотношения:

$$M_{21,t} = m_2 C_m R_1 T \left(\frac{M_{11}}{m_1} - \frac{M_{21}}{\beta^3 m_2} \right), \quad (3)$$

$$M_{11,t} + \rho_{11} v_1 S \Big|_0^L = -C_m m_2 R_1 T \left(\frac{M_{11}}{m_1} - \frac{M_{21}}{\beta^3 m_2} \right). \quad (4)$$

Здесь

$$M_{11}(t) = \int_0^L \rho_{11}(t, x) S dx, \quad M_{21}(t) = \int_0^L \rho_{21}(t, x) S dx -$$

массы гелия в колонке вне частиц и внутри частиц в момент времени t .

Уравнения (3) и (4) описывают исходное явление в терминах массы гелия, попавшего в колонку и находящегося вне и в частицах. В уравнении (4) выражение $\rho_{11} v_1 S \Big|_0^L$ представляет разность массы гелия, вышедшей из колонки, и массы, вошедшей в нее, за единицу времени. Если обозначить всю массу гелия в колонке через

$$M(t) = M_{11}(t) + M_{21}(t), \quad (5)$$

тогда можно записать следующее соотношение:

$$\rho_{11} v_1 S \Big|_0^L = -\frac{dM(t)}{dt}. \quad (6)$$

С помощью подстановки (5) и (6) в систему (3)–(4) переходим к следующей системе уравнений:

$$\frac{dM_{21}}{dt} + \alpha_1 \alpha_2 M_{21} = \alpha_1 M, \quad (7)$$

$$M_{11}(t) = M(t) - M_{21}(t). \quad (8)$$

Здесь $\alpha_1 = C_m m_2 R_1 T / m_1$, $\alpha_2 = 1 + m_1 / (\beta^3 m_2)$.

Систему уравнений (7)–(8) относительно неизвестных функций $M_{11}(t)$ и $M_{21}(t)$ будем решать в предположении

$$M_{21}(0) = M_{21}^0$$

и заданной функции $M(t)$.

Решением этой системы уравнений будут следующие зависимости:

$$M_{21}(t) = \alpha_1 \int_0^t M(\tau) e^{\alpha_1 \alpha_2 (\tau-t)} d\tau + M_{21}^0 e^{-\alpha_1 \alpha_2 t}, \quad (9)$$

$$M_{11}(t) = M(t) - \alpha_1 \int_0^t M(\tau) e^{\alpha_1 \alpha_2 (\tau-t)} d\tau - M_{21}^0 e^{-\alpha_1 \alpha_2 t}.$$

Исследование процесса заполнения колонки с закрытым выходным концом

Пусть в некоторый момент времени в колонку, заполненную ценосферами, начали подавать смесь метана и гелия, причем массовый расход гелия на входе в колонку сохраняется до некоторого времени t_0 . После этого входной конец закрывают и в колонке остается M_0 гелия. Исследуем задачу поглощения гелия по такой схеме.

Масса гелия в колонке будет задаваться следующим соотношением:

$$M(t) = \begin{cases} \frac{t}{t_0} M_0, & t < t_0, \\ M_0, & t \geq t_0. \end{cases} \quad (10)$$

Здесь t_0 – момент времени, когда прекратили подачу смеси на вход в колонку; M_0 – масса гелия, попавшая в колонку за все время эксперимента.

Подставляя (10) в формулу (9), получим следующие выражения:

$$M_{21}(t) = \begin{cases} \frac{M_0}{\alpha_2} \left(\frac{t}{t_0} - \frac{1 - e^{-\alpha_1 \alpha_2 t}}{\alpha_1 \alpha_2 t_0} \right), & t < t_0, \\ \frac{M_0}{\alpha_2} \left(1 - \frac{e^{-\alpha_1 \alpha_2 t_0} - 1}{\alpha_1 \alpha_2 t_0} e^{-\alpha_1 \alpha_2 t} \right), & t \geq t_0. \end{cases} \quad (11)$$

Здесь $\alpha_1 = C_m m_2 R_1 T / m_1$, $\alpha_2 = 1 + m_1 / (\beta^3 m_2)$; t_0 – момент времени, когда прекратили подачу смеси на вход в колонку; M_0 – масса гелия, попавшая в колонку за все время эксперимента.

Для приложений интересен ответ на вопрос, когда будет наилучшее заполнение колонки. Из формулы (11) видно, что при $t \rightarrow \infty$ $M_{21}(t) \rightarrow M_0 / \alpha_2$.

Исходя из того, что функция, задаваемая соотношением (11), монотонно возрастает, найдем значения t , при которых

$$|M_{21}(t) - M_0 / \alpha_2| < \varepsilon M_0 / \alpha_2. \quad (12)$$

Данная ситуация может возникнуть в двух случаях: при $t < t_0$ или $t \geq t_0$. Первый вариант является оптимальным, потому что ценосферы насыщаются до нужного значения еще до перекрытия подачи смеси. Второй случай представляет интерес исследования. Предположим, что именно он имеет место, тогда путем подстановки (11) в (12) легко понять, что это все t , для которых выполнено следующее условие:

$$t > \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2} \ln \left(\frac{e^{\alpha_1 \alpha_2 t_0} - 1}{\alpha_1 \alpha_2 t_0} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \right) \geq t_0. \quad (13)$$

Интересным является соотношение между параметрами колонки и газов, при которых колонка заполняется до нужного уровня в момент $t < t_0$ до перекрытия подачи гелия. Если условие (12) выполнено для некоторого $t < t_0$, то вследствие монотонного убывания функции $M_0 / \alpha_2 - M_{21}(t)$ оно выполнено и для $t = t_0$. Подставляем (11) в (12) при $t = t_0$ и получаем

$$\frac{1 - e^{-\alpha_1 \alpha_2 t_0}}{\alpha_1 \alpha_2 t_0} < \varepsilon.$$

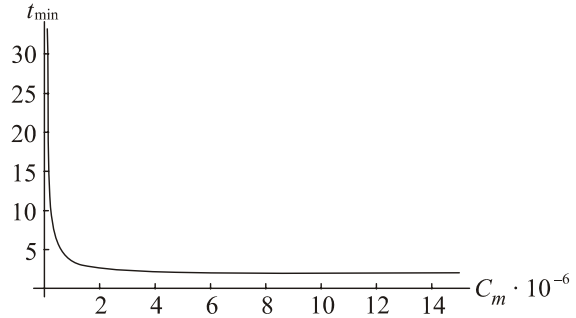
Рассмотрим колонку со следующими параметрами: $m_2 = 0,6$; $m_1 = 0,4$; $T = 300$ К; $R_1 = 8,31/0,004$ м²/К; $\beta^3 = 0,7$. Возьмем, например, $\varepsilon = 0,02$, $t_0 = 2$ с.

Будем считать, что насыщение колонки наступает в момент времени $t > t_0$, тогда, обозначив через $f(C_m)$ правую часть неравенства (13), получим зависимость минимального заполнения колонки $t_{\min}$ от коэф-

фициента проницаемости C_m для данных параметров колонки:

$$t > t_{\min} = f(C_m) = \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2} \ln \left(\frac{e^{\alpha_1 \alpha_2 t_0} - 1}{\alpha_1 \alpha_2 t_0} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \right) \geq t_0,$$

изображенную ниже.



Из графика видно, что удовлетворительные результаты получаются при коэффициенте проницаемости C_m примерно начиная от 10^{-7} с/м².

Выводы

На основании анализа уравнений многофазного движения смеси газов через неподвижный слой ценосфер получены точные зависимости массы гелия, попавшего в частицы, от времени эксперимента и общей массы гелия, находящегося в колонке.

В случае заполнения колонки с ценосферами гелием при постоянной подаче гелия на вход и закрытом выходном конце колонки получены зависимости массы гелия, попавшего в частицы, от времени эксперимента. Получена оценка времени работы колонки для достижения требуемого заполнения.

Показана возможность применения этой формулы на практике для проектирования установок по обогащению природного газа гелием, например подбор ценосфер с определенным коэффициентом проницаемости и толщиной стенок, а также определение оптимальных параметров колонки.

Список литературы

1. Долгушев С. В., Фомин В. М. Гелий: его значение в промышленности, современные и перспективные способы производства: Препр. / Институт теоретической и при-

кладной механики СО РАН; № 5 – 2003. Новосибирск, 2003. 23 с.

2. *Верецагин С. Н., Куртеева Л. И., Рабчевская А. А. и др.* Использование ценосфер летучих зол от сжигания каменных углей для процессов диффузионного разделения газов // Тр. Всерос. конф. «Процессы горения и взрыва в физикохимии и технологии неорганических материалов». Москва, 24–27 июня 2002 г. М.: ИСМАН, 2002. С. 70–74.

3. *Кизильштейн Л. Я., Дубов И. В., Шницглуз А. Л., Парада С. Г.* Компоненты зол и шлаков. М.: Энергоатомиздат, 1995.

4. *Верецагин А. С., Верецагин С. Н., Фомин В. М.* Математическое моделирование движения импульса концентрации гелия по колонке, заполненной ценосферами // ПМТФ. 2006.

Материал поступил в редколлегию 14.10.2007

В. Н. Горев^{1,2}, М. М. Катасонов^{1,2}, В. А. Щербаков¹

¹ Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: gorev_vasily@ngs.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗНИКНОВЕНИЯ И РАЗВИТИЯ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ-ПРЕДВЕСТНИКОВ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ В ДВУМЕРНЫХ И ТРЕХМЕРНЫХ ПОГРАНИЧНЫХ СЛОЯХ

Приведено экспериментальное исследование волновых пакетов-предвестников, предшествующих фронтам продольных структур в пограничных слоях плоской пластины, прямого и скользящего крыльев. Изучен характер нестационарного течения в области фронтов продольных структур. Показано, что процесс образования и развития исследуемых возмущений малой амплитуды амплитудно независим. Предложены общие закономерности развития волновых пакетов-предвестников.

Ключевые слова: аэрофизика, пограничный слой, продольные структуры, волновые пакеты, ламинарно-турбулентный переход.

Введение

Среди объектов исследования в аэрофизике процесс перехода течения от ламинарного состояния к турбулентному является, пожалуй, одним из интереснейших и сложных явлений. Ламинарно-турбулентный переход имеет место в различных сдвиговых течениях, таких как пограничные слои, струи, течения в каналах [1]. Интерес исследователей к процессу перехода объясняется как желанием получить новые фундаментальные знания, которые позволят дополнить известную на сегодняшний день физическую картину явления, так и технической стороной вопроса, в частности снижением аэродинамического сопротивления и шумности летательных аппаратов.

Потенциальная возможность существенного снижения сопротивления путем затягивания ламинарно-турбулентного перехода в пограничном слое обтекаемых тел методами активного управления пристенным течением хорошо известна. Такие методы, в частности

с использованием MEMS-технологий, предполагают локальное импульсное воздействие на вихревые возмущения, присутствующие в слое сдвига, на ранних этапах их развития [2; 3]. Однако в случае импульсного воздействия в пограничный слой вводится возмущение с широким спектром частот, часть из которых попадает в область неустойчивости течения (если таковая имеется), в результате в пограничном слое возникнет волновой пакет, который будет нарастать ниже по потоку и может привести к образованию турбулентного пятна. Таким образом, затягивание перехода к турбулентности не будет достигнуто. Возникновение волновых пакетов неоднократно наблюдалось в экспериментах по исследованию нестационарных продольных структур в пограничных слоях плоской пластины [4; 5] и прямого крыла [6–8], возбуждаемых с помощью мембраны или методом вдува (отсоса). Явление получило название «предвестник», поскольку предшествует фронту продольной структуры.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-01-00034), президента РФ по поддержке ведущих научных школ РФ (НШ – 964.2003.1) и молодых российских ученых (МК – 1655.2005.1), Рособразования (РНП.2.1.2.3370).

Данная работа посвящена изучению волновых пакетов (предвестников), возникающих в пограничных слоях в областях, предшествующих резкому изменению скорости потока внутри пограничного слоя (фронты продольного возмущения), как объектов, которые наряду с вторичной неустойчивостью продольных структур являются звеном процесса ламинарно-турбулентного перехода при повышенной степени турбулентности набегающего потока.

Исследование предвестников в пограничном слое Блазиуса

Преимущество пограничного слоя плоской пластины в том, что он является наиболее простым и хорошо изученным примером пристенного течения. Кроме того, в случае пограничного слоя Блазиуса сравнить экспериментальные данные с теорией существенно проще, чем в случае пограничного слоя на крыле.

Эксперимент проводился в условиях малых значений локального числа Рейнольдса, и пограничный слой в области измерений оставался устойчивым относительно возмущений малых амплитуд ($Re_{\delta^*} < 500$). Импульсы вдува (отсоса) воздуха приводили к возник-

новению в пограничном слое продольных локализованных возмущений. Амплитуда возмущений в окрестности источника достигала 10 % от скорости на верхней границе пограничного слоя (U_0). В своей центральной части генерируемые возмущения на начальном этапе развития (при значениях координаты x порядка длины щели) близки к двумерным, ниже по потоку двумерность нарушается. Перед фронтом продольной структуры наблюдается волновой пакет-предвестник, который, как и фронт продольной структуры, первоначально является двумерным. По мере развития пакета вниз по потоку его амплитуда постепенно затухает.

Как известно [4], исследуемые продольные структуры распространяются в пограничном слое с локальной скоростью среднего течения (рис. 1). Иначе говоря, вблизи стенки возмущение движется сравнительно медленно, а в области верхней границы пограничного слоя – практически со скоростью внешнего течения. Таким образом, в каждый момент времени положение фронта относительно оси x зависит от координаты y . В то же время скорость распространения волновых возмущений не зависит от координаты y . В результате, волновой пакет и фронт продольной структуры накладываются друг на друга (см. рис. 1). Вблизи поверхности предвестник опережает фронт, тогда как выше в пограничном слое он движется вместе с фронтом продольной структуры в локально нестационарной зоне течения. С другой стороны, предвестник, возникающий на заднем фронте, находится в пограничном слое, возмущенном продольной структурой. Поскольку размер источника возмущений (длина щели в поверхности модели) существенно больше толщины пограничного слоя, можно считать, что в пределах продольной структуры течение представляет собой пограничный слой с несколько отличными от невозмущенного течения характеристиками. В случае генерации структуры отсосом воздуха профиль скорости в ней становится более наполненным, соответственно устойчивость течения возрастает, и в области заднего фронта возмущения предвестник не возникает. Напротив, при вдуве воздуха устойчивость течения уменьшается и появляется предвестник (см. рис. 1).

Сравним продольные возмущения, полученные отсосом пограничного слоя различной интенсивности. При распространении

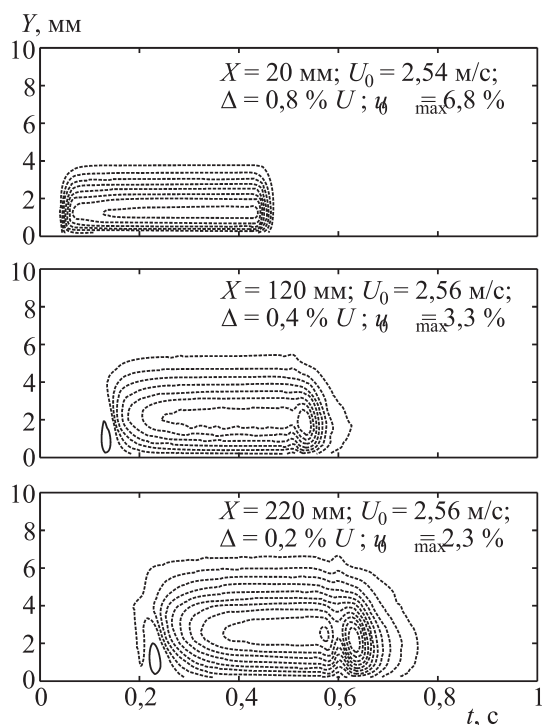


Рис. 1. Изолинии пульсационной составляющей скорости течения, образующей продольную структуру (вдув), и предвестники на ее переднем и заднем фронтах на различных расстояниях от источника возмущений

нии вдоль потока подверженные дисперсии возмущения трансформируются, их фронты сглаживаются и выделяются волновые пакеты (рис. 2, а). Амплитуда пакета на переднем фронте увеличивается с ростом интенсивности продольной структуры.

На поведении волнового пакета вблизи заднего фронта сказывается устойчивость течения внутри продольной структуры, зависящая от ее амплитуды, с увеличением которой устойчивость возрастает и амплитуда предвестника соответственно уменьшается. Вместе с тем при стремлении к нулю интенсивности продольной структуры амплитуда волнового пакета также должна уменьшаться.

При нормировке осциллограмм на их максимум продольного возмущения (рис. 2, б–г) часть кривых совпадает. Остающиеся отличия особенно велики между осциллограммами продольных структур наименьшей (1) и наибольшей (4) амплитуд (рис. 2, в). С уменьшением интенсивности структур соответствующие им кривые сближаются (рис. 2, г).

Нормированные осциллограммы возмущений с наименьшими амплитудами (1, 2) отличаются лишь в пределах незначительных флуктуаций скорости, притом, что возмущение 2 вдвое интенсивнее возмущения 1. Данный факт свидетельствует о линейности поведения продольных структур и их предвестников по амплитуде при ее малой величине.

Предвестники в пограничном слое прямого крыла

Если рассматривать волновой пакет как часть фронта продольной структуры, которая выделилась в результате дисперсии, то в момент начала вдува или отсоса эта частотная составляющая имеет геометрию источника возмущений, т. е. фронты волн, составляющих пакет, изначально прямые, или квазидвумерные. Эволюция геометрии предвестников в процессе развития вниз по потоку несколько различается в зависимости от метода генерации (вдув или отсос). В процессе развития предвестника волновые фронты искривляются, и пакет теряет двумерность (рис. 3). Далее искривленные волновые фронты трансформируются в Λ -структуры. В случае генерации продольного возмущения отсосом, переход предвестника в трехмерное состояние происходит

несколько медленнее, чем в случае вдува. Пространственная структура предвестника на поздней стадии развития может быть довольно сложна и включать в себя не только Λ -структуры, но и некоторые продольные образования (см. рис. 3).

Предвестник в области заднего фронта продольного возмущения на термоанемометрических визуализациях наблюдается в виде перетяжек продольной структуры (рис. 4), что напоминает варикозную моду вторичной неустойчивости [9; 10]. Поведение предвестников сильно зависит от параметров породившей их продольной структуры, однако кроме этого на динамику развития волновых пакетов влияют величина и знак градиента давления внешнего течения (рис. 5).

Неблагоприятный градиент давления способствует нарастанию волновых пак-

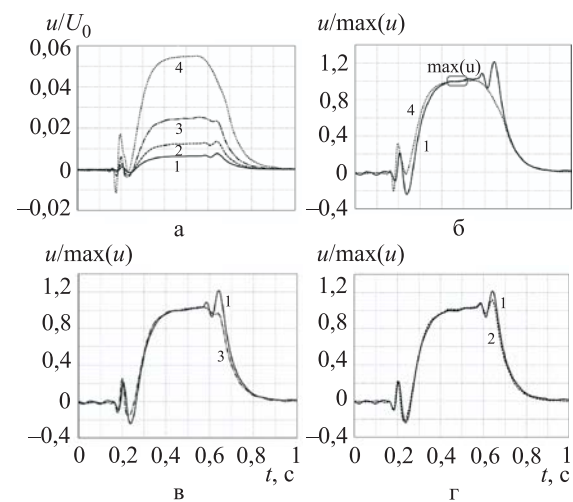


Рис. 2. Осциллограммы продольных возмущений, полученных в пограничном слое Блазиуса методом отсоса вдали от источника возмущений (а). Приведенные к единице осциллограммы продольных возмущений: амплитуды 1 и 4 (б), амплитуды 1 и 3 (в), амплитуды 1 и 2 (г)

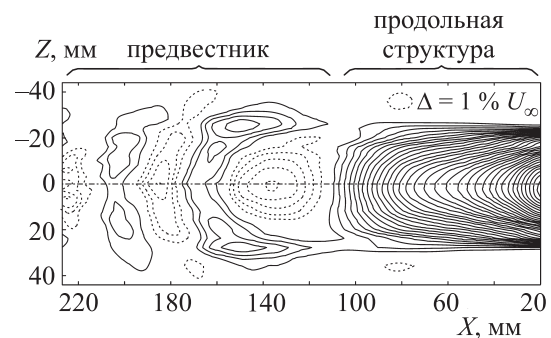


Рис. 3. Изолинии мгновенного поля пульсаций продольной составляющей скорости полосчатой структуры (метод отсоса) и предвестника на ее переднем фронте в двумерной области, огибающей поверхность модели на уровне максимума пульсаций скорости

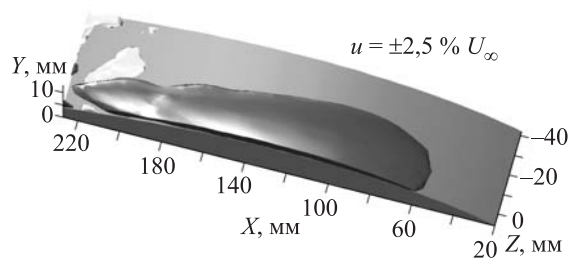


Рис. 4. Задний фронт продольной структуры (вдув), светлые области – превышение скорости ($u = 2,5 \% U_\infty$), темные области – дефект скорости ($u = -2,5 \% U_\infty$), серым цветом обозначена поверхность модели крыла.

В области $140 \text{ мм} < X < 230 \text{ мм}$ наблюдаются перетяжки продольной структуры, а также локализованные области превышения скорости, что соответствует волновому пакету (предвестнику), за ним следует задний фронт продольной структуры

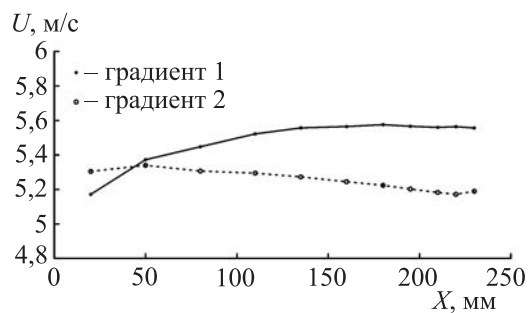


Рис. 5. Распределение скорости на внешней границе пограничного слоя вдоль координаты X . Сплошная линия соответствует давлению внешнего течения: 1 – благоприятный градиент давления; 2 – неблагоприятный градиент давления

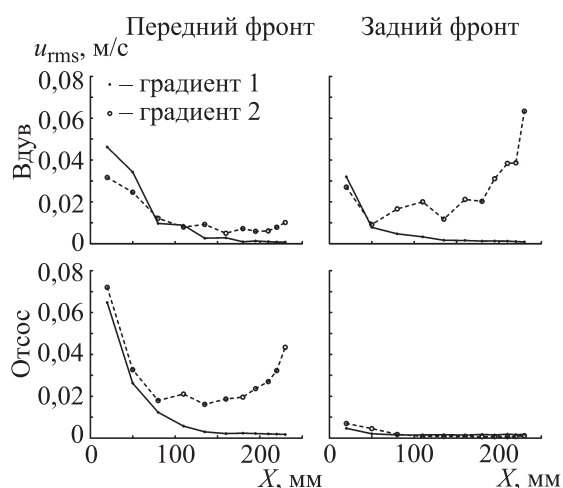


Рис. 6. Изменение среднеквадратичного отклонения пульсационной составляющей скорости волновых пакетов (предвестников) вниз по потоку в зависимости от их локализации (передний / задний фронт продольной структуры), метода генерации продольной структуры (вдув / отсос) и градиента давления внешнего течения

тов. В случае вдува интенсивно растет предвестник на заднем фронте. Это обусловлено тем, что в случае вдува продольная структура образована областью с дефектом скорости. В таком течении профили пограничного слоя менее наполнены, чем в невозмущенном течении, и соответственно течение менее устойчиво.

На заднем фронте в случае генерации продольного возмущения методом отсоса предвестник затухает, поскольку в этом случае профили течения, в котором распространяется волновой пакет, более наполнены и соответственно более устойчивы. С другой стороны, на переднем фронте волновой пакет распространяется по невозмущенному пограничному слою и не должен зависеть от профилей скорости течения внутри продольной структуры, а следовательно, и от метода ее генерации (вдув или отсос). Однако динамика развития пакета на переднем фронте продольной структуры, полученной методом вдува, заметно отличается от того же в случае отсоса. Это объясняется различным характером течения на переднем фронте продольных структур при вдуве и при отсосе (рис. 6). В условиях благоприятного градиента давления волновые пакеты затухают независимо от метода генерации продольной структуры или параметров фронта, на котором возник волновой пакет. Таким образом, градиент давления является обязательным условием для нарастания предвестников.

Волновые пакеты-предвестники в пограничном слое скользящего крыла

Измерения в пограничном слое скользящего крыла также показали присутствие подобных предвестников, поэтому далее эксперимент проводился по той же методике, что и на прямом крыле, с поправкой на угол скольжения.

Компьютерные визуализации исследуемых возмущений, выполненные на основе измеренных полей скорости, показали, что в отличие от возмущений на прямом крыле предвестники и продольные структуры в пограничном слое скользящего крыла за счет трехмерности течения становятся асимметричными. Происходит закрутка продольной структуры. Поскольку в пограничном слое скользящего крыла, на различных расстояниях от поверхности, течение имеет различные направления, то вдув (отсос) меняют не только наполненность про-

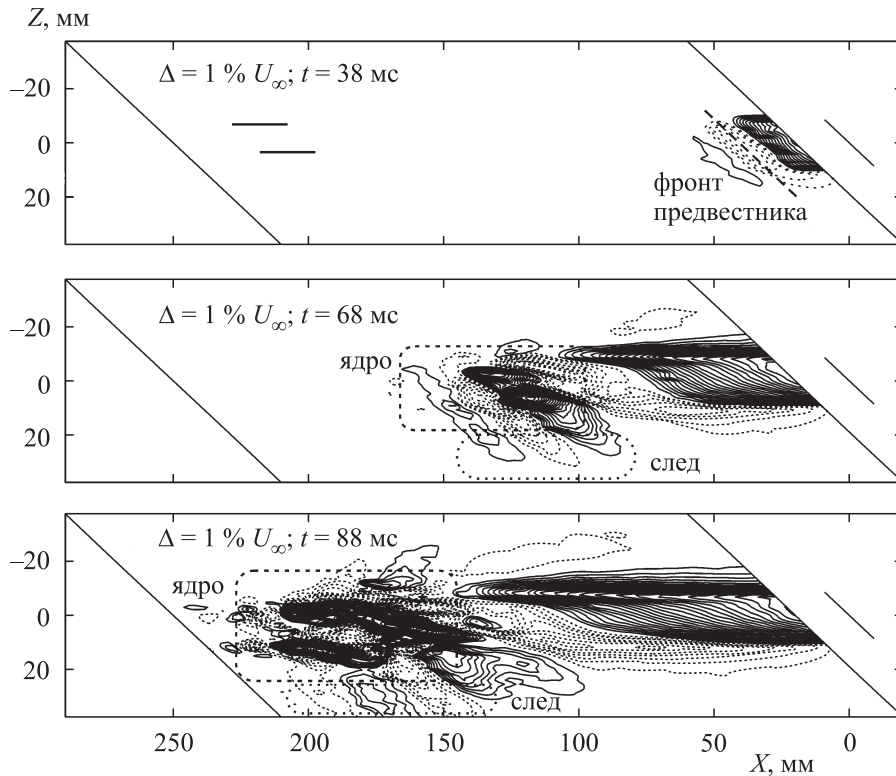


Рис. 7. Изолинии мгновенных полей пульсационной составляющей продольной компоненты скорости для полосчатой структуры, полученной методом отсоса, и предвестника на ее переднем фронте

филя продольной компоненты скорости, но и направление локального вектора скорости в области потока за щелью.

На начальном этапе развития фронт продольного возмущения параллелен передней кромке крыла, что определяется ориентацией щели. В области потока непосредственно перед фронтом возникает квазидвумерный волновой пакет, также параллельный передней кромке крыла (рис. 7). Далее происходит нарушение двумерности, предвестник разделяется на сугубо трехмерное «ядро» и на практически нейтральный пакет волн, ориентированных вдоль передней кромки крыла, – «след». Измерения поля скорости в трехмерной области потока после удаления низкочастотной составляющей, соответствующей продольному возмущению, позволили обнаружить в составе ядра предвестника Λ -структуру (рис. 8).

Таким образом, амплитуда ядра быстро растет, что приводит к формированию Λ -структур ниже по потоку (см. рис. 8). Затем ядро, представляющее собой пакет Λ -структур, превращается в турбулентное пятно.

Если пакет на переднем фронте фактически бежит по невозмущенному пограничному

слою, то развитие волновых пакетов на заднем фронте продольной структуры происходит в условиях течения, искаженного продольным возмущением. Динамика развития предвестников в этом случае существенно

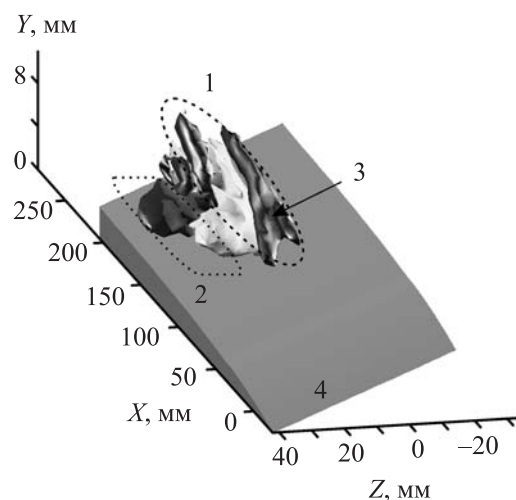


Рис. 8. Компьютерная визуализация поздней стадии развития предвестника на переднем фронте продольной структуры (отсос). Низкочастотная составляющая удалена из массива данных. Светлые области соответствуют пульсациям скорости $u = 3,5 \% U_\infty$; темные – $u = -3,5 \% U_\infty$; 1 – ядро предвестника; 2 – квазидвумерный след; 3 – Λ -структуры; 4 – поверхность крыла

зависит от условий генерации продольного возмущения, в частности сильно отличаются случаи вдува и отсоса.

Заключение

Обнаружено, что в пограничном слое Блазиуса предвестники могут возникать и в условиях устойчивого пограничного слоя вне кривой нейтральной устойчивости. Однако в этом случае нарастания волновых пакетов не наблюдается. Более того, процесс образования и развития исследуемых возмущений малой амплитуды амплитудно независим.

Изучен характер нестационарного течения в области фронтов продольных возмущений, полученных методом вдува / отсоса в пограничных слоях плоской пластины и прямого крыла. Найдено, что градиент давления внешнего течения является важным и определяющим фактором, влияющим на возникновение и развитие предвестников.

В пограничном слое скользящего крыла получены волновые пакеты-предвестники фронтов продольных структур. Изучена их пространственная геометрия, зафиксирована трансформация предвестника в турбулентное пятно. Предложены общие закономерности развития волновых пакетов-предвестников в условиях скользящего крыла.

Список литературы

1. Бойко А. В., Грек Г. Р., Довгаль А. В., Козлов В. В. Физические механизмы перехода к турбулентности в открытых течениях. М.; Ижевск, 2006. 304 с.
2. Gad-el-Hak M. Flow control: Passive, Active, and Reactive Flow Management. Cambridge: Univ. Press, 2000. 448 p.
3. Haasl S., Mucha D., Chernoray V. et al. Hybrid-mounted micromachined aluminum

hotwires for wall shear-stress measurements // J. Microelectromech. Syst. 2005. Vol. 14. No. 2. P. 254–260.

4. Альфредссон П. Х., Катасонов М. М., Козлов В. В. Генерация и развитие «пассивных» возмущений в пограничном слое Блазиуса // Теплофизика и аэромеханика. 2001. Т. 8, № 3. С. 363–370.

5. Katasonov M. M., Park S.-H., Sung H. J., Kozlov V. V. Instability of streaky structures in a Blasius boundary layer // Exper. Fluids. 2005. Vol. 38. No. 3. P. 363–371.

6. Чернорай В. Г., Спиридонов А. Н., Катасонов М. М., Козлов В. В. Генерация возмущений локализованным вибратором в пограничном слое прямого крыла // ПМТФ. 2001. Т. 42, № 5. С. 37–45.

7. Горев В. Н., Катасонов М. М., Козлов В. В. Волновые предвестники продольных структур на прямом и скользящем крыле // Докл. РАН. 2006. Т. 410, № 1. С. 53–56.

8. Горев В. Н., Катасонов М. М. Возникновение и развитие предвестников на фронтах продольных структур в пограничном слое прямого крыла // Теплофизика и аэромеханика. 2004. Т. 11, № 3. С. 403–415.

9. Литвиненко Ю. А., Грек Г. Р., Козлов В. В. и др. Экспериментальное исследование варикозной неустойчивости полосчатой структуры в пограничном слое скользящего крыла // Теплофизика и аэромеханика. 2004. Т. 11, № 1. С. 1–10.

10. Литвиненко Ю. А., Чернорай В. Г., Козлов В. В. и др. О нелинейной синусоидальной и варикозной неустойчивости в пограничном слое (обзор) // Теплофизика и аэромеханика. 2004. Т. 11, № 3. С. 339–365.

Материал поступил в редколлегию 09.10.2007

М. Н. Андреев ¹, А. К. Ребров ^{1,2}, А. И. Сафонов ², Н. И. Тимошенко ²

¹ Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

² Институт теплофизики СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: rebrov@itp.nsc.ru; vika@itp.nsc.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОСАЖДЕНИЯ ТОНКИХ ТЕФЛОНОПОДОБНЫХ ПЛЕНОК ГАЗОСТРУЙНЫМ МЕТОДОМ *

Предложен новый газоструйный метод осаждения полимерных пленок в вакууме. Определены характеристики реактора для разложения фторопласта по результатам масс-спектрометрических измерений состава газа. Получены образцы пленок из наноразмерных структур при различных условиях. Обнаружены различия в морфологии и составе пленок в зависимости от условий осаждения.

Ключевые слова: сверхзвуковая струя газа, вакуум, полимеризация, пленки, наноструктуры, политетрафторэтилен (тефлон), масс-спектрометрия.

Интенсивное развитие нанотехнологий, способов получения наноразмерных частиц и наноструктурированных материалов на основе полимеров дало новый импульс к разработке методов получения тонких покрытий в вакууме. Предложенный новый метод нанесения пленок политетрафторэтилена (ПТФЭ) [1; 2] позволяет использовать фторопласт как химический реагент для получения тетрафторэтилена (ТФЭ) с дальнейшей полимеризацией на поверхности. Этот метод позволяет не только наносить покрытие ПТФЭ на поверхности, но и утилизировать отработанные изделия из фторопласта.

Газоструйный метод осаждения полимерных пленок обладает рядом преимуществ перед известными из литературы [3; 4; 5]. Важнейшими из них являются широкий диапазон технологических режимов и сравнительная простота смены условий осаждения.

Схема установки для исследования процессов полимеризации тетрафторэтилена в данной работе представлена на рис. 1. Источником ТФЭ является реактор, оборудованный омическими нагревателями, термодатчиками и сменным соплом. При

нагревании выше 750 К фторопласт разлагается на газообразные компоненты, давление в реакторе поднимается и при истечении газа через сопло в вакуум формируется сверхзвуковая струя. В поток газа помещается мишень, на которой происходит образование пленки материала подобного ПТФЭ при полимеризации на ее поверхности.

При использовании данного метода осуществляются процессы разложения фторопласта практически до мономера C_2F_4 . При последующей его полимеризации синтезируется материал, подобный фторопласту, но с длиной полимерной цепочки меньше исходной. При изучении и организации процесса полимеризации важным является вопрос о составе образующегося газа в реакторе и о структуре получаемого материала покрытия. По литературным данным [6], состав компонент при термическом разложении фторопласта сильно зависит от температуры и давления. Для эффективной реализации газоструйного метода необходимо разложение ПТФЭ в реакторе до тетрафторэтилена C_2F_4 с минимальным содержанием других компонент. Поэтому состав струи определялся *in situ*.

* Авторы выражают благодарность за помощь при проведении измерений ИК-спектров и ДСК-кривых сотрудникам ИОХ СО РАН В. И. Маматюк и И. К. Шундриной.

Контроль состава истекающих из реактора газов осуществляется с помощью квадрупольного масс-спектрометра Hiden Analytical HPR-60 (рис. 2). Реактор на координатном столе может перемещаться таким образом, чтобы подставлять под зонд масс-спектрометра любой участок струи, в том числе область внутри реактора. Масс-спектр сканировался в диапазоне от 1 до 1 000 атомных единиц массы (а. е. м.). В управляющем масс-спектрометром компьютере имеется обширный

банк данных по фрагментам различных молекул, образующихся при электронном ударе в камере детектора масс-спектрометра.

На рис. 3 приведен пример записи масс-спектра, который получен при измерениях в вакуумной камере атмосферы остаточных газов и тетрафторэтилена. Компоненты молекулы C_2F_4 : CF (31 а. е. м.), CF_2 (50 а. е. м.), C_2F_2 (62 а. е. м.), C_2F_3 (81 а. е. м.), C_2F_4 (100 а. е. м.), хорошо разрешимы на фоне масс атмосферных газов и воды.

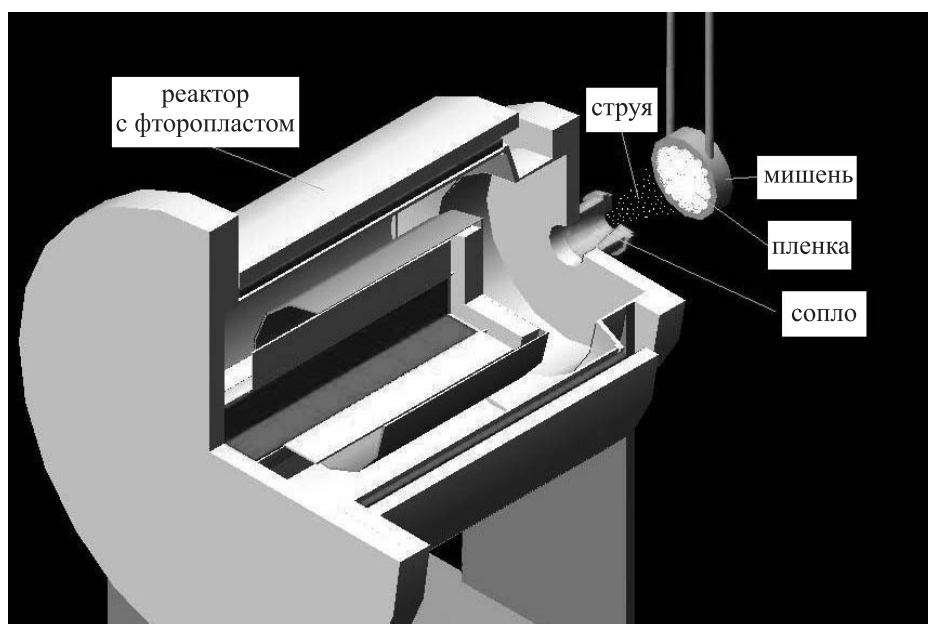


Рис. 1. Схема установки для нанесения тефлоноподобных покрытий

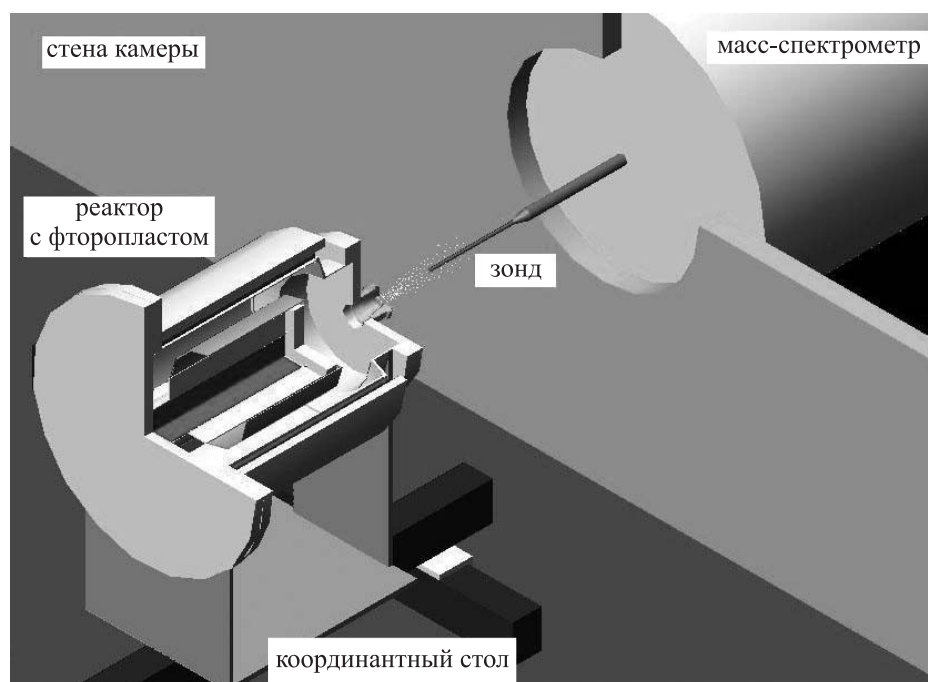


Рис. 2. Схема масс-спектрометрических измерений

На рис. 4 представлены результаты измерений состава газа в струе за соплом и внутри него. На диаграммах показаны доли различных компонент с указанием точки измерения в струе. Видно, что струя за соплом формируется из тетрафторэтилена с точностью до нескольких процентов. Количество более тяжелых компонент молекул газа образующегося в реакторе не превышает 3 %, что согласуется с данными работы [6].

Как уже упоминалось, добавление в поток других газов предположительно влияет на структуру наносимых пленок. В случае добавления в поток легких газов происходит ускорение тяжелых молекул C_2F_4 легким га-

зом в соответствии с составом компонент и их молекулярными весами. Энергия тяжелых молекул в потоке при предельно глубоком расширении превышает энергию легких молекул в m_1/m_2 раз, где m_1, m_2 – молекулярные массы тяжелой и легкой компонент газа. Процесс полимеризации C_2F_4 в потоке смеси газов будет происходить по-другому в условиях, существенно отличных по сравнению с потоком чистого C_2F_4 . От этого зависят морфология, структура и свойства полученного материала.

Для проверки состава образующихся компонент в смеси были проведены измерения по схеме, описанной выше. В качестве лег-

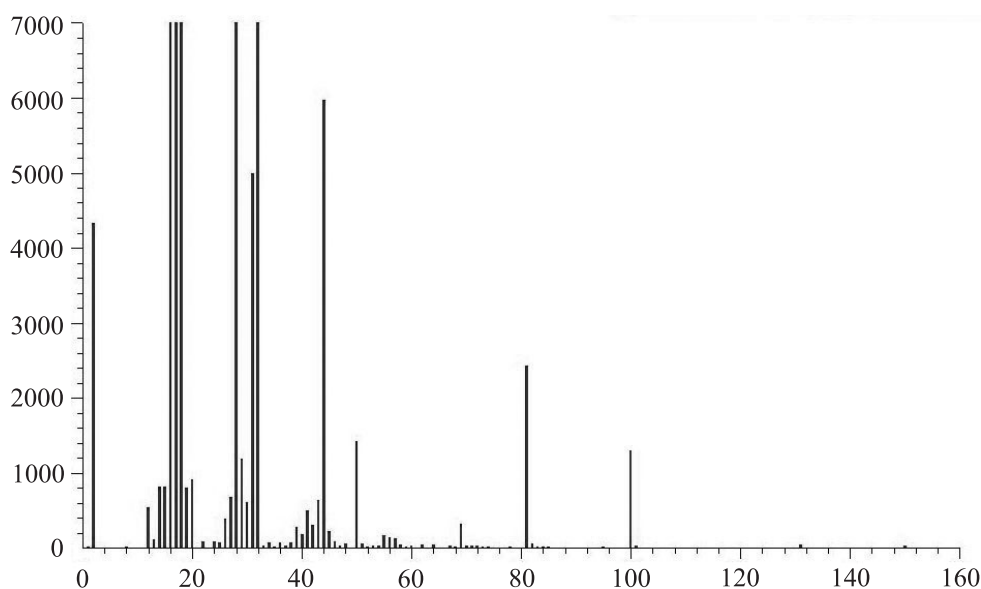


Рис. 3. Пример снятого масс-спектра

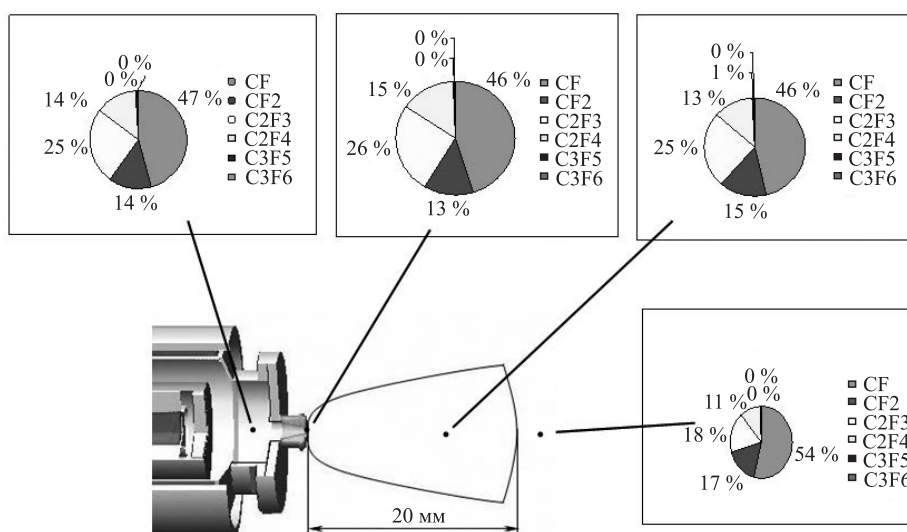


Рис. 4. Результаты измерений состава газов в реакторе и потоке

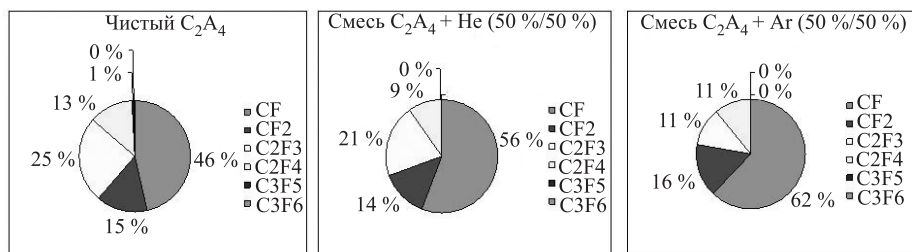


Рис. 5. Компоненты разложения фторопласта при наличии инертных газов в струе

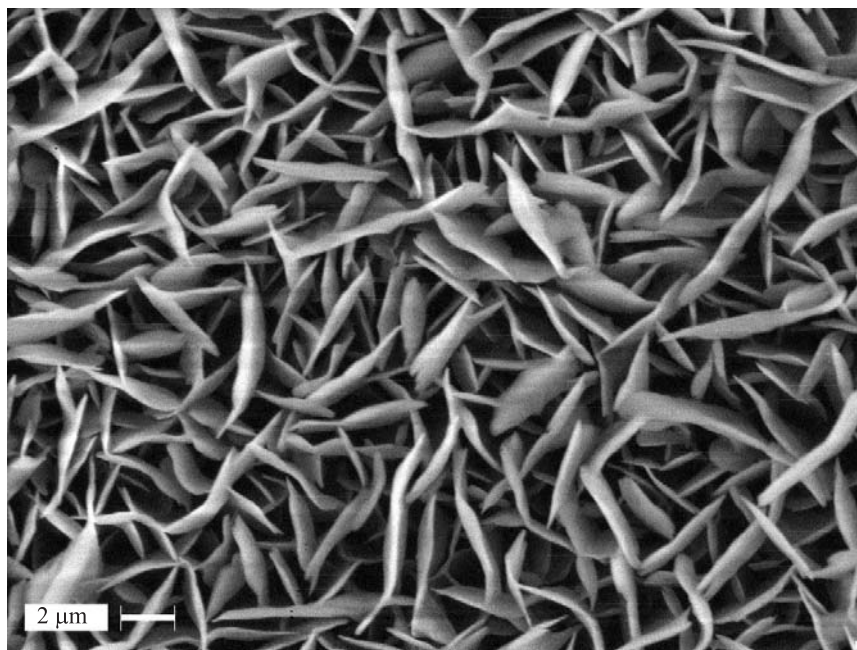


Рис. 6. Морфология пленки C_2F_4 , осажденной на медную подложку с $T = 450$ К

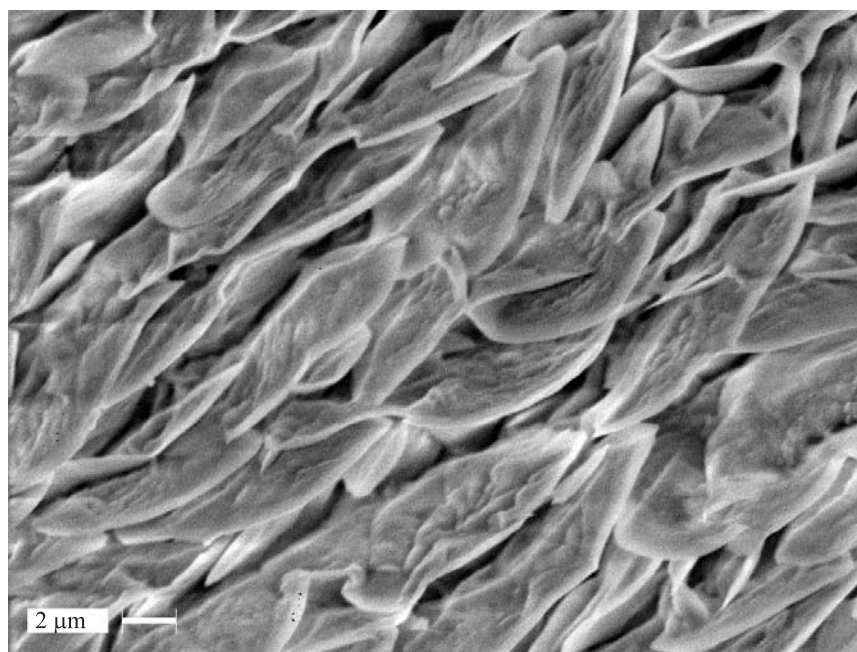


Рис. 7. Морфология пленки C_2F_4 , осажденной на медную подложку с $T = 500$ К

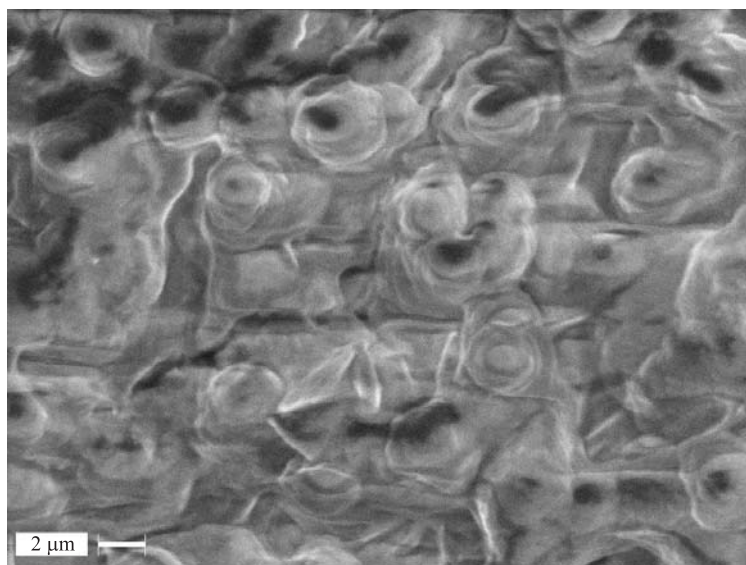


Рис. 8. Морфология пленки, осажденной из смеси C_2F_4 с гелием на медную подложку с $T = 500\text{ K}$

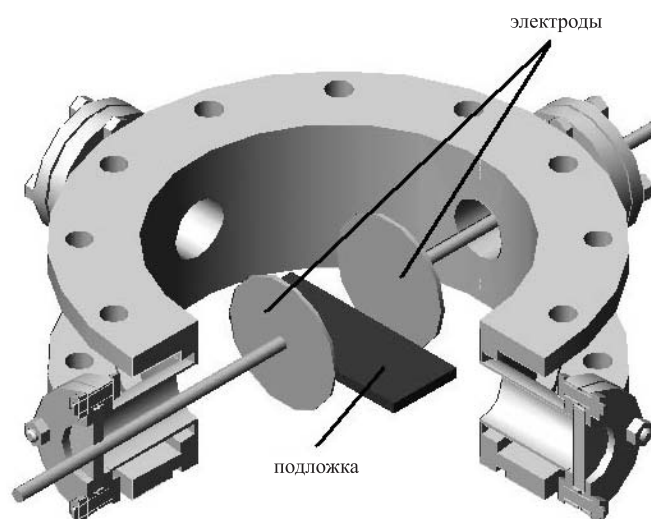


Рис. 9. Схема эксперимента с электрическим разрядом

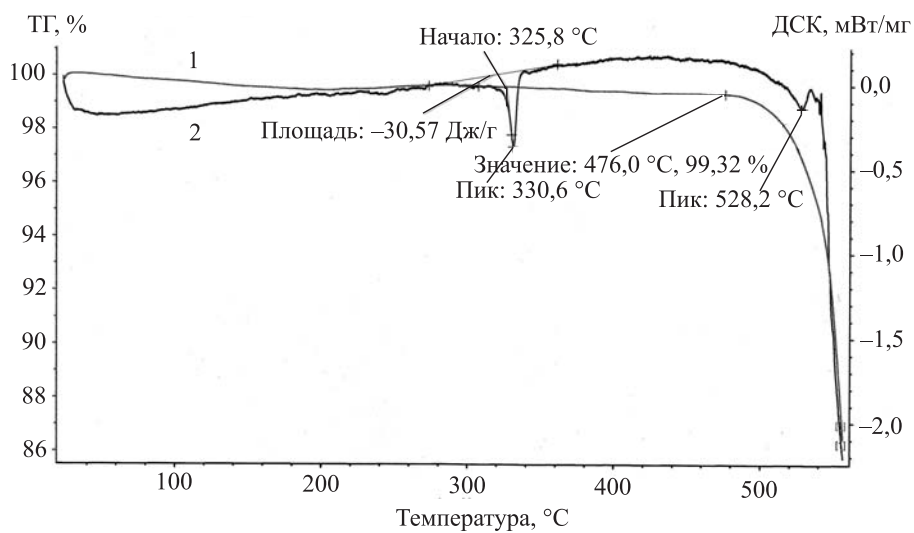


Рис. 10. ДСК исходного фторопласта

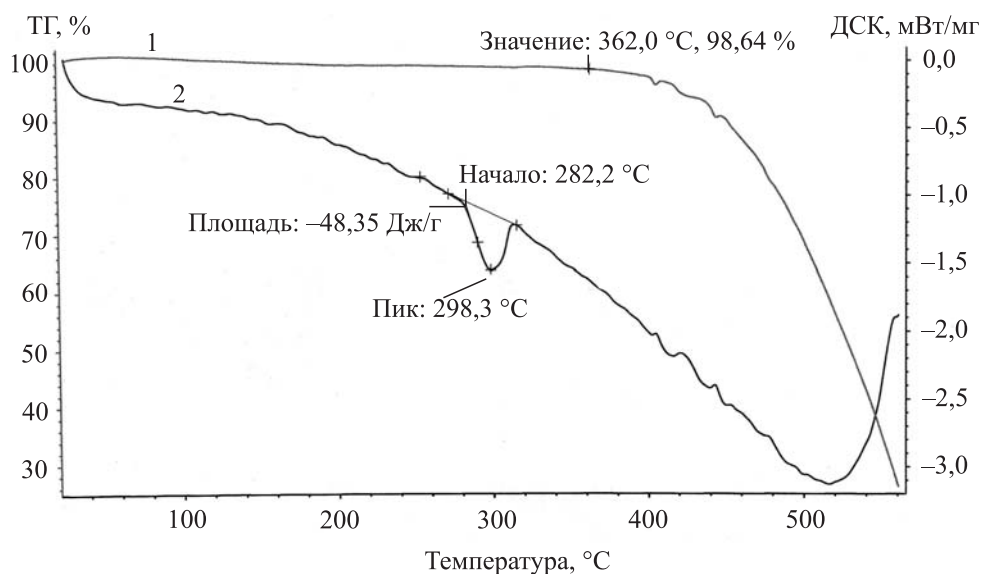


Рис. 11. ДСК фторопласта, полученного в условиях высокочастотного разряда

кой компоненты использовались инертные газы – гелий и аргон.

На рис. 5 представлены только результаты измерений компонент C_2F_4 для наглядного сравнения с предыдущим экспериментом, из которых видно, что добавление гелия или аргона не меняет состав компонент, образующихся в камере детектора масс-спектрометра при электронном ударе молекулы C_2F_4 .

В соответствии со схемой, представленной на рис. 1, были нанесены покрытия на различные материалы для некоторых условий полимеризации. На рис. 6, 7, 8 приведены фотографии покрытий, нанесенных на медную подложку при различных условиях, полученные на электронном микроскопе Leo-420.

Как и следовало ожидать, морфология пленок существенно зависит от условий нанесения: температуры подложки, наличия легкой компоненты в потоке.

Существенного изменения длины цепочки полимера по сравнению с исходным материалом и возможным изменением линейной структуры молекулы на ветвистую с наличием кратных связей можно ожидать при воздействии на процесс полимеризации электрического высокочастотного разряда в соответствии с результатами работы [7]. Для таких экспериментов была использована описанная выше схема. Расположение электродов для разряда показано на рис. 9. Разряд с частотой 27 МГц генерировался источником питания УВЧ-50-01. Струя газа и подложка (мишень) полностью находились в области высокочастотного разряда.

Полученный материал покрытия анализировался с использованием дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Суть этого метода заключается в одновременном определении массы образца материала и количества подводимого тепла при заданной скорости нагрева $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ в минуту. Таким образом, определяется зависимость теплоемкости материала от температуры и количество испаряющегося или разложившегося материала. Полученные кривые (рис. 10, 11) позволяют обнаружить точки фазовых переходов, долю фазы в общем количестве материала. Сравнение кривых для разных образцов позволяет судить об отличии в составе материалов.

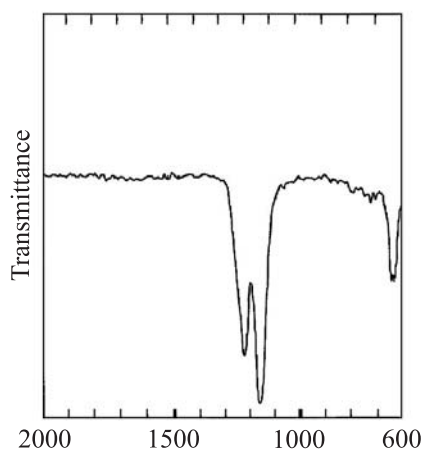


Рис. 12. ИК-спектр исходного ПТФЭ

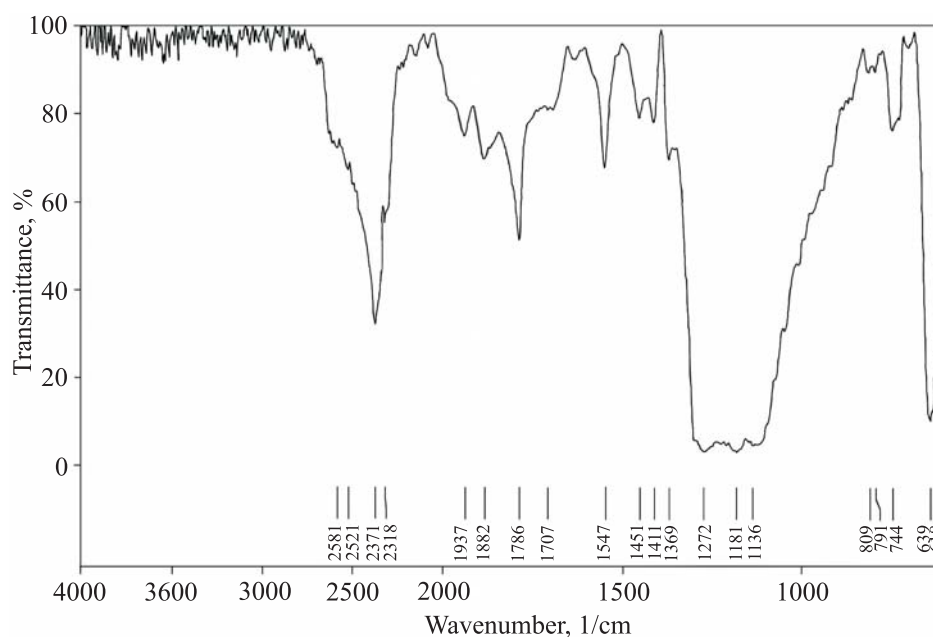


Рис. 13. ИК-спектр полученного материала

Анализ ДСК показал существенные отличия свойств полученного материала от исходного. На представленных рисунках видно, что с ростом температуры наблюдается рост теплоемкости. Пик фазового перехода при 330,6 °С для исходного материала сместился на 398,3 °С для полученного. При температуре 362 °С потеря массы составляет уже более 1 %, и с дальнейшим повышением температуры процесс потери массы ускоряется. Перечисленные отличия свойств материала полученной пленки от свойств исходного фторопласта, полученного промышленным способом, а именно более ранний фазовый переход, а также более низкие температуры, при которых происходит активное разложение фторопласта, говорят о том, что получаемый нами материал имеет структуру, отличающуюся от исходной.

Для выяснения особенностей отличия исходного и полученного материалов были определены инфракрасные спектры исходного и одного из новых материалов. Данные получены с использованием Фурье-спектрометра ИФС-66 и представлены на рис. 12, 13.

На ИК-спектре исходного фторопласта (см. рис. 12) видны пики поглощения в интервалах 500–700 и 1 100–1 300 см⁻¹. Не наблюдается пиков поглощения излучения в интервалах 800–1 000 и 1 400–4 000 см⁻¹. Этот спектр идентичен ИК-спектрам для ПТФЭ, известным в литературе [8].

На ИК-спектре полученного материала (см. рис. 13) присутствуют симметричные (1 155 см⁻¹) и антисимметричные (1 215 см⁻¹) пики растяжения связей в CF₂, колебательные спектры для группы CF₂ и моды растяжения цепочки (640/625 см⁻¹), пики, идентифицируемые с CF–CF₂ группой (1 780 см⁻¹). Группы CF₃–CF₂–CF₃–CF+ активируются в интервале от 730 до 745 см⁻¹, они отвечают за деформационные колебания. Моды растяжения для боковых концевых групп CF₃ имеют пик активации в районе 980 см⁻¹. Плечо полосы 1 100–1 300 см⁻¹ в окрестности 1 360 см⁻¹ отвечает за колебания концевой группы с двойной связью CF=CF₂. Два пика на 1 260 и 1 180 см⁻¹ соответствуют полосе растяжения связи CF.

ИК-спектр исходного ПТФЭ (см. рис. 12) не имеет пиков поглощения на 739 и на 780 см⁻¹. В то же время многочисленные комплексные исследования кристаллических и аморфных пленок тефлона показывают, что поглощение около 739 см⁻¹ соответствует случайным молекулярным цепочкам и присутствию аморфной фазы.

Изменения в геометрии пиков поглощения означает разницу в молекулярных структурах осажденного ПТФЭ.

Представленные результаты исследований позволяют сделать заключение о возможностях нового метода получения полимерных материалов с различными свойствами.

Список литературы

1. Ребров А. К., Тимошенко Н. И., Шиликин А. В. Осаждение тонких тефлоноподобных пленок из сверхзвуковой струи C_2F_4 в вакууме // ДАН. 2004. Т. 399, № 6. С. 766–770.
2. Rebrov A. K., Sharafudinov R. S., Shishkin A. V., Timoshenko N. I. Free C_2F_4 Jet Deposition of Thin Teflon-like Films // Plasma Processes and Polymers. 2005. Vol. 2. No. 6. P. 464–471.
3. Драчев А. И. Практическое использование полимеров, синтезированных в низкотемпературной плазме // Нанотехнология. 2004. № 1. С. 57–63.
4. Красовский А. М., Толстомятов Е. М. Получение тонких пленок распылением полимеров в вакууме. Минск, 1989.
5. Казаченко В. П. Технологические методы формирования наноразмерных полимерных покрытий в вакууме // Нанотехнология. 2004. № 1. С. 48–54.
6. Lewis E. E., Naylor M. A. Pyrolysis of Polytetrafluoroethylene // J. Amer. Chem. Soc. 1947. Vol. 69. No. 8. P. 1968–1970.
7. Гильман А. Б., Шифрина Р. Р., Потанов В. К. и др. О полимеризации полифтораренов под действием тлеющего разряда // Химия в интересах устойчивого развития. 2004. Т. 12. С. 611–617.
8. Sprouse Collection of Infrared Spectra. Sprouse Scientific Systems. Pennsylvania: Paoli Inc., 1987. Book 1: Polymers.

Материал поступил в редколлегию 17.10.2007

А. Е. Зарвин, Н. Г. Коробейщиков, В. В. Каляда, В. Ж. Мадирбаев

Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: zarvin@phys.nsu.ru

ТЕХНИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДАМИ ИМПУЛЬСНОЙ ГАЗОДИНАМИКИ

В работе изложен практический опыт, проблемы и методы их решения, накопленные авторами при постановке исследовательских задач на комплексе экспериментальных стендов ЛЭМПУС Новосибирского государственного университета. Обсуждается техника импульсных газодинамических исследований, особенности и возможности моделирования стационарных течений, методы инициации плазмохимических реакций в режиме импульсного истечения, достоинства импульсных сверхзвуковых потоков для моделирования газозвучных технологических процессов. Приведены результаты, полученные в импульсных сверхзвуковых потоках газовых смесей и низкотемпературной плазмы.

Ключевые слова: газовая динамика, динамика разреженного газа, импульсное истечение, сверхзвуковая струя, плазмохимические реакции, газозвучные реакции, газовые смеси, электромагнитный клапан, квазистационарный поток, электронный пучок, газовый разряд, кластеры.

В последние годы возрос интерес исследователей и технологов к газозвучным процессам, протекающим в низкотемпературной плазме при давлениях ниже атмосферного [1–2]. Однако, несмотря на многообразие возможных реакций, их практическое применение до сих пор ограничено отдельными попытками осаждения пленочных покрытий [3], получения водорода из углеводородов [4]. Среди важнейших причин – многоканальность и обратимость плазмохимических реакций, протекающих, как правило, с невысокой интенсивностью. Плазмохимическая кинетика определяется энергетической структурой реагентов, т. е. концентрацией молекул и атомов каждого компонента в отдельных энергетических состояниях, вероятностями переходов между энергетическими состояниями. Среди основных задач исследователей – определение оптимальных условий для генерирования реакционноспособных частиц (возбужденных атомарных и молекулярных ионов, свободных радикалов), регулирование состава реагентов и их энергетических параметров для направления реакций по нужному каналу и предотвращения нежелательных обратных процессов.

На сегодняшний день одним из наиболее перспективных является метод газоструйной плазмохимии [5]. Главной особенностью ме-

тода является активация газовой среды не в статических равновесных условиях, а в свободной сверхзвуковой струе, в условиях сильной неравновесности реагентов как по поступательным степеням свободы, так и по внутренним энергетическим состояниям. Неравновесность обусловлена газодинамикой свободного истечения и может наблюдаться как между энергетическими состояниями отдельных компонент, так и между различными компонентами потока. Газодинамические процессы при свободном истечении газов и газовых смесей в достаточной мере изучены, управляемы путем задания исходных параметров – параметров торможения (давления P_0 , температуры T_0 , диаметра сопла d_0 , начального процентного состава рабочей смеси), они успешно моделируются и оптимизируются. Высокие скорости плазмохимических процессов (характерные времена 10^{-2} – 10^{-5} с) хорошо соотносятся с характерными газодинамическими временными параметрами. Быстрое падение частоты столкновений между частицами вплоть до их полного прекращения вниз по течению от источника является эффективным механизмом предотвращения обратных реакций («закалка» реакции).

Для инициации плазмохимических реакций, как правило, используется внешний ис-

точник электронов, которым является пучок высокоэнергетических электронов или газовый разряд.

Поскольку число столкновений в потоке за время истечения пропорционально давлению торможения и диаметру газового источника, для получения развитой столкновительной кинетики потока исследователи стремятся максимально увеличить расход газа из источника, что требует пропорционального роста производительности откачных средств, высокой скорости компрессии для утилизации продуктов, увеличения электрической мощности плазмообразующих устройств. Это приводит к значительному росту стоимости выполняемых работ и часто затруднительно в лабораторных условиях. Поэтому при разработке, отладке и моделировании технологических процессов наиболее удачной альтернативой нам представляется переход на импульсную технику.

При практической работе с импульсными газовыми источниками основным является вопрос подобия импульсного потока стационарному истечению. Очевидно, такое подобие возможно только в пределах ограниченной области — области квазистационарного течения. Ранее [6] нами было показано, что при движении от источника длительность квазистационарного участка уменьшается. При этом чем выше давление фонового газа в камере расширения, тем быстрее это падение. Соответственно при использовании клапанов с малой длительностью газового импульса возможна ситуация, когда даже при сформировавшемся на выходе из источника стационарном потоке, в точке измерения параметры не будут соответствовать стационарной струе, т. е. не могут быть рассчитаны и управляемы. Поэтому использование клапанов, формирующих короткие (длительностью порядка 100 мкс) газовые импульсы требует поддержания в камере расширения высокого вакуума (до 10^{-5} тор и ниже), что соответственно требует использования высоковакуумных откачных средств.

Известно, что импульсные газовые клапаны серийно выпускаются рядом фирм. Однако эти клапаны, как правило, работают в узком диапазоне характеристик и формируют газовые импульсы треугольной формы и малой длительности (10–100 мкс).

Реализованные авторами импульсные газоструйные устройства обеспечивают воз-

можность достижения больших (до 20 г/с) мгновенных расходов сырья. Прежде всего это электромагнитный клапан с набором звуковых и сверхзвуковых сопел, системой энергопитания и управления, обеспечивающий истечение газа из форкамеры в течение регулируемого промежутка времени (от 150 мкс до 3 мс), с высокой скважностью (не менее 100), частотой импульсов от 1 до 10 Гц и возможностью регулирования давления торможения в широких пределах, от 1 до 2 МПа. Конструкция клапана описана в [7]. Из приведенного примера (рис. 1) видно, что сформированный газовый импульс имеет трапециевидную форму с квазистационарным ядром большой протяженности (~ 1 мс).

Для диагностики сверхзвуковых импульсных струй использована измерительная система на основе электронно-пучковой спектроскопии и молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Газодинамический молекулярный пучок формируется из импульсной струи с помощью скиммера ($d_s = 0,53$ мм) и коллиматора ($d_c = 6$ мм). В качестве детектора используется квадрупольный масс-спектрометр с ионизацией электронным ударом. Управление экспериментом, запись и обработка данных измерений осуществляются с помощью системы регистрации импульсных сигналов. Временное разрешение системы ~ 1 мкс. С ее помощью определяются компонентный состав и энергетические характеристики импульсных потоков, в том числе кластированных. Подробное описание диагностической системы приведено в [8].

Для активации газов и газовых смесей используются самостоятельный и несамостоятельный разряды. Электронная пушка с накаливаемым катодом и отклоняющими электромагнитами позволяет конфигурировать электронный пучок с энергией электронов свыше 5 кэВ. Система фокусировки обеспечивает возможность ввода электронного пучка в любую область газового потока, в том числе организовывать «веерный» охват всего потока, производя развертку электронного пучка на любой угол в пределах 110° . К сожалению, имеющиеся электронные пушки с гексаборид-лантановым катодом не позволяют увеличить электронный ток свыше десятых долей ампера. Известные электронные пушки с полым катодом дают более высокую плотность электронов в пучке, однако исследователям, использующим электронные пуш-

ки этого типа, пока не удалось обеспечить требующуюся для активирующих устройств стабильность работы. Увеличение вводимой в газовый поток мощности с помощью разрядных устройств может приводить к значительному разогреву потока и требует соответствующих устройств утилизации тепла.

Разработанное нами разрядное устройство обеспечивает зажигание разряда только на время истечения газового импульса. При этом ток разряда в импульсе удается поднять до 300 А, а вводимую в поток энергию – до 300 Дж. Разрядная система состоит из заостренных соосно расположенных электродов, выполненных из вольфрама и установленных перпендикулярно к оси газового потока. Величина разрядного промежутка составляет 5 мм. Питание разряда осуществляется с помощью емкостного источника. Величина накопительной емкости Q варьируется от 10 до 330 мкФ.

В экспериментах измерялись зависимости тока разряда в цепи катода, интенсивности свечения газа в разряде и интенсивности ионных пиков в масс-спектре импульсного молекулярного пучка от времени. Разрядная система устанавливалась на фиксированном расстоянии от сопла (5–20 калибров, т. е. диаметров сопла) так, чтобы избежать перегрева клапанного устройства с форкамерой электронами из области разряда и в то же время не отодвигаться на слишком большое расстояние от среза сопла в область низкой плотности газа, обусловленной резким расширением сверхзвукового потока. В отсутствие газовых импульсов фоновое давление в вакуумной камере, в которой располагался газовый источник и проводились исследования, составляло $\sim 10^{-1}$ Па. В этих условиях в отсутствие газового потока при подаче на электроды рабочего напряжения ($U_0 = 1\text{--}2$ кВ) разряд не загорался. После включения импульсного источника плотность газа в разрядном промежутке достигала величин, достаточных для инициации разряда.

В ходе эксперимента наблюдались два типа разряда: тлеющий и дуговой, в зависимости от задаваемых условий. На рис. 2 приведены характерные временные развертки сигналов, зарегистрированные при активации струи метана, истекающей из сопла. Для удобства сравнения все сигналы нормированы к единице в максимуме. Время отсчитывалось от момента запуска клапана. Задержка открытия

клапана относительно команды запуска составляла ~ 300 мкс. Еще через $\sim 30\text{--}50$ мкс после открывания клапана передний фронт истекающего газа достигал разрядного промежутка. В результате плотность газа увеличивалась до величин, достаточных для инициации разряда. Благодаря малой RC-постоянной разрядной цепи максимальное значение разрядного тока достигалось за ~ 50 мкс. Большие мгновенные значения тока разряда вызывали быстрый разряд емкостного источника, в результате длительность разряда (ширина токового сигнала на полувысоте) в данном эксперименте составляла ~ 100 мкс. Световой импульс формировался вследствие излучения возбужденных частиц истекающего газа, поэтому он служил индикатором воздействия разряда на рабочую среду. Полуширина светового импульса, измеренного с помощью фоторегистратора, превышает полуширину токового и зависит от времен жизни возбужденных частиц.

Ниже приведены токовые (рис. 3) и световые (рис. 4) импульсы, полученные в аргоне при разных напряжениях накопителя. Энергия разряда растет пропорционально напряже-

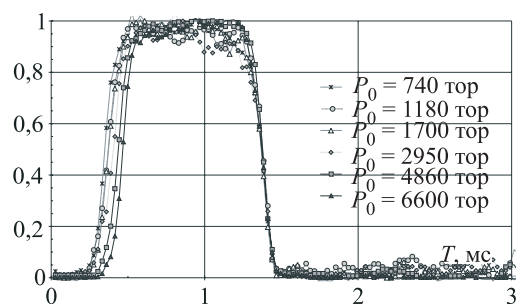


Рис. 1. Пример формы газового импульса на выходе из клапана, зарегистрированного с помощью электронно-пучковой диагностики на оси потока в 20 калибрах от среза сопла

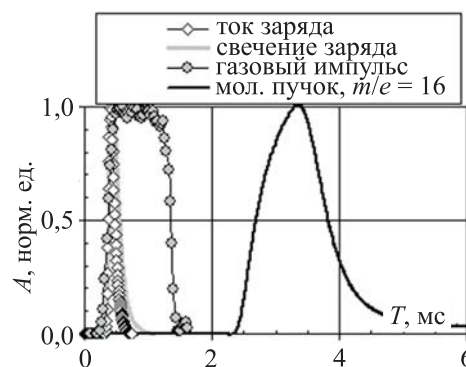


Рис. 2. Характерные временные развертки сигналов. Давление в источнике $P_0 = 475$ кПа. Емкость $Q = 11$ мкФ. Начальное напряжение $U_0 = 1,1$ кВ

нию накопителя. Причем с ростом U_0 разряд загорается при меньших начальных значениях плотности газового потока, что и приводит к плавному смещению токового импульса по шкале времени на 70 мкс (см. рис. 3). Световой импульс смещается пропорционально токовому. Однако при этом амплитуда светового импульса заметно падает (см. рис. 4). Уменьшается также длительность свечения разряда. Можно сделать вывод, что коэффициент использования энергии, вводимой в импульсный поток газа, понижается с ростом напряжения, подаваемого на электроды.

Воздействие разряда (рис. 5) приводит к заметному (в 4–5 раз) падению сигналов

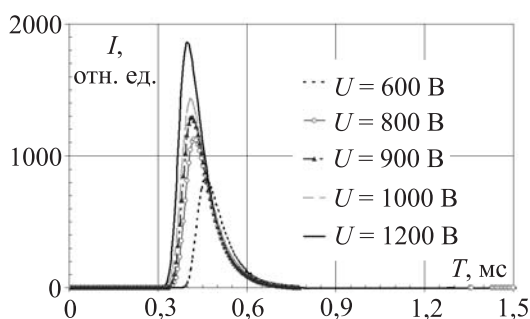


Рис. 3. Токовые импульсы

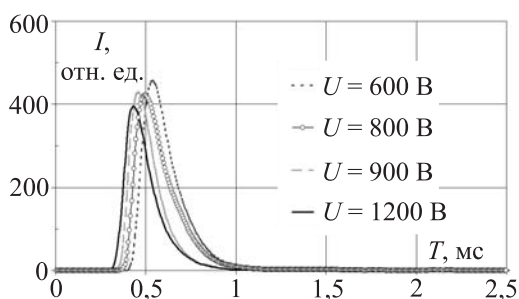


Рис. 4. Световые импульсы

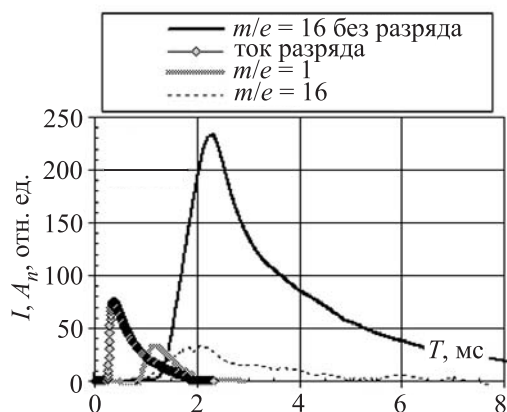


Рис. 5. Изменения состава образовавшихся радикалов в одном из режимов

на массах основных ионов CH_4^+ ($m/e = 16$), CH_3^+ ($m/e = 15$) и других и росту сигналов на массах H^+ ($m/e = 1$), H_2^+ ($m/e = 2$) и C^+ ($m/e = 16$). Измерения при выключенном ионизаторе масс-спектрометра обнаружили наличие в газовом потоке значительного количества ионов, также достигающих детектора. Времена прихода отдельных радикалов и ионов значительно меньше характерных газодинамических времен нейтральных частиц.

Таким образом, разработанная импульсная техника и предложенный способ активации импульсных газовых потоков обеспечивают возможность эффективного моделирования плазмохимических реакций в газовых, в том числе кластированных, потоках при значительной экономии расходов на проведение эксперимента. Импульсная техника моделирования плазмохимических процессов предоставляет дополнительные возможности изучения плазмохимических реакций в газовой среде с кластерами. Присутствие кластеров может изменить ход плазмохимических реакций как из-за снижения пороговых значений энергии активации и ионизации молекул, находящихся в кластере, так и вследствие возможности «сшивки» кластеров в молекулу при обработке электронами. Следствием этого может стать ускорение процессов синтеза наночастиц, в том числе смешанного состава (например, обнаруженные в исследованиях на импульсном оборудовании кремний-углеродные структуры [9]). Импульсная техника, обеспечивающая мгновенные значения расхода и давления торможения, недостижимые на установках постоянного действия, позволяет не только моделировать процессы, наблюдаемые в стационарных потоках газа, с экономным расходом материалов, но и исследовать явления, лежащие за пределами возможностей стационарных установок.

Список литературы

1. Jauberteau J. L., Thomas L. et al. High reactivity of CH_2 radical in an AR- CH_4 post-discharge // Plasma Chem. and Plasma Proc. 1998. Vol. 18. No. 1. P. 137–151.
2. Savinov S. Y., Hwaung Lee et al. The effect of vibrational excitation of molecules on plasmachemical reactions involving methane and nitrogen // Plasma Chem. and Plasma Proc. 2003. Vol. 23. No. 1. P. 159–173.

3. Bilyalov R., Poortmans J., Sharafutdinov R. *et al.* // IEE Proc. Circuits Devices Syst. 2003. Vol. 150. No. 4.

4. Rabinovich A., Alexeev N., Bromberg L., *et al.* Low current plasmatron fuel converter having enlarged volume discharges. United States Patent N 6881386. Issued on April 19, 2005. Assignee: Massachusetts Institute of Technology.

5. Винокуров В. А., Шарафутдинов Р. Г., Тычков Ю. И. // Химия и технология топлив и масел. 2005. № 3. С. 25–26.

6. Коробейщиков Н. Г., Зарвин А. Е., Мадирбаев В. Ж. Газодинамика импульсных сверхзвуковых недорасширенных струй: пространственно-временные характеристики // ЖТФ. 2004. Т. 74, вып. 8. С. 21–29.

7. Зарвин А. Е., Коробейщиков Н. Г. Импульсные сверхзвуковые струи: применение, проблемы, решения // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2006. Т. 1, вып. 2. С. 29–47.

8. Зарвин А. Е., Коробейщиков Н. Г., Мадирбаев В. Ж. и др. Универсальный малогабаритный вакуумный комплекс для газокINETических исследований // ПТЭ, 2000. № 5. С. 64–70.

9. Зарвин А. Е., Мадирбаев В. Ж., Коробейщиков Н. Г. и др. Влияние малых добавок метана и моносилана на кластерообразование в импульсных сверхзвуковых потоках аргона // ЖТФ. 2005. Т. 75, вып. 11. С. 52–58.

Материал поступил в редколлегию 18.10.2007

А. Б. Докторов, А. А. Кадетов, А. А. КиприяновИнститут химической кинетики и горения СО РАН
ул. Институтская, 3, Новосибирск, 630090, РоссияНовосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: kadetov_al@ngs.ru**УЧЕТ СИЛОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В МНОГОЧАСТИЧНОМ ВЫВОДЕ
НЕМАРКОВСКИХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

В работе рассматривается необратимая реакция $A + B \rightarrow C + B$ при наличии как силового, так и химического взаимодействия. Рассматривается модель жесткой сферы.

Ключевые слова: немарковская кинетика, силовое взаимодействие, теория встреч, корреляционная форма.

Введение

Пионерской работой по теории необратимых реакций, зависящих от подвижности реагентов, явилась работа Смолуховского [1]. В ней реагенты рассматривались как твердые шары с идеальной поглощающей способностью, а движение считалось непрерывной диффузией. В рамках этой модели изменение концентраций реагентов во времени описывается стандартными уравнениями химической кинетики с той лишь разницей, что константа скорости зависит от времени. Это связано с формированием нестационарного профиля диффузии вокруг реагента.

Впервые многочастичное обоснование результата Смолуховского было проведено в работе [2] с использованием так называемого суперпозиционного расщепления. Однако попытка обобщить этот метод на обратимые реакции и неоднородные системы привела к тому, что получались уравнения, противоречащие качественным физическим соображениям. Встал вопрос разработки универсального многочастичного метода вывода кинетических уравнений. Предлагались разные методы. Однако наиболее многообещающими в плане последовательности подхода, высокой точности, возможности обобщения на сложные (многостадийные) реакции и отказа от грубых модельных представлений в описании структуры реагентов и их подвижности явились методы, основанные на адаптации современных методов неравновесной статистической меха-

ники к химически реагирующим системам. Проведенная адаптация позволила получить кинетические уравнения, имеющие типичный для неравновесной статистической механики интегро-дифференциальный вид. Был сформулирован универсальный метод вывода кинетических уравнений для широкого класса реакций [3].

Однако в предыдущих работах, где применялся указанный подход, частицы считались точечными, а силовое взаимодействие принималось во внимание лишь на последних шагах вывода кинетических уравнений путем его учета в эволюции эффективной пары реагентов. Таким образом, учет силового взаимодействия был непоследовательным.

Цель данной работы – сравнение результатов последовательного включения силового взаимодействия с полученными ранее результатами и анализ правомерности и границ применимости использованного ранее подхода.

Постановка задачи

В данной работе мы рассмотрим необратимую объемную реакцию $A + B \rightarrow C + B$. Примером такой реакции может быть изомеризация, где A и C – это пространственные изомеры одного и того же вещества, а B – катализатор, под действием которого происходит реакция. К хорошо известным примерам такой реакции можно также отнести процесс тушения люминесценции. В этом случае частица A – это возбужденная частица (донор), передающая возбуждение

частице В (акцептор), которая быстро переходит в основное состояние путем безызлучательной дезактивации.

Реагенты А, В и С рассматриваются как многочастичная реагирующая система, помещенная в инертную в химическом отношении сплошную среду. Таким образом, в отличие от кинетической теории реакций в жидкости мы пренебрегаем молекулярной структурой растворителя. Однако существенным преимуществом такой модели является более последовательное рассмотрение элементарного акта реакции и движения реагентов.

Реагирующая система считается пространственно однородной. Движение реагирующих частиц в среде мы рассматриваем как Марковский процесс случайных блужданий в общем случае посредством стохастических прыжков конечной величины и будем описывать его введением оператора движения (в общем случае интегрального) $\hat{L}'_\alpha$, где α – любая из реагирующих частиц.

Силовые взаимодействия реагирующих частиц между собой будем считать консервативными, определяемыми потенциальными энергиями U_{AA} , U_{AB} , U_{AC} , U_{BB} , U_{BC} , U_{CC} , каждая из которых зависит от расстояния между соответствующими частицами, а их влияние на движение будем задавать операторами $\hat{L}'_{\alpha\beta}$, где α, β – любые из частиц А, В или С.

Если рассматривать движение реагентов как континуальную диффузию, то $\hat{L}'_\alpha = D_\alpha \Delta_\alpha$, где D_α – коэффициент диффузии данного вида частиц, а Δ_α – лапласиан по координатам соответствующей частицы. Данный оператор описывает свободное диффузионное движение в отсутствие силовых взаимодействий. Влияние силовых взаимодействий на движение реагентов в этом случае задается как

$$\hat{L}'_{\alpha\beta} = \frac{D_\alpha}{kT} \vec{\nabla}_\alpha (\vec{\nabla}_\alpha U_{\alpha\beta}) + \frac{D_\beta}{kT} \vec{\nabla}_\beta (\vec{\nabla}_\beta U_{\alpha\beta}), \quad (1)$$

где $\vec{\nabla}_\alpha$ – набла оператор α -й частицы; k – постоянная Больцмана; T – температура. Дифференцирование в первом слагаемом идет по координате частицы α , а во втором – по координате частицы β .

Реакционную способность реагентов А и В будем описывать с помощью четырехцен-

тровой скорости $R_{ijk}(C_k \rightarrow B_j | A_{0i} \rightarrow B_{0j})$ [3] элементарного акта, где A_{0i}, B_{0j} – координаты исходных реагентов А и В, а C_k, B_j – координаты продуктов соответственно. Таким образом, мы учитываем так называемый «эффект отдачи», т. е. то, что превращение реагента А в реагент С в процессе элементарного химического акта сопровождается изменением координаты реагента В, поэтому $B_{0j} \neq B_j$ [4]. Далее координаты любых частиц реакционной системы мы будем обозначать аналогичным образом. Наряду с четырехцентровой скоростью $R_{ijk}(C_k \rightarrow B_j | A_{0i} \rightarrow B_{0j})$ введем также полную скорость элементарного акта рассматриваемой необратимой реакции:

$$\begin{aligned} w(A_{0i} - B_{0j}) &= -V_{ij}(A_{0i} - B_{0j}) = \\ &= \int R_{ijk}(A_{0i} \rightarrow C_k, B_{0j} \rightarrow B_j) dB_j dC_k. \end{aligned}$$

Эта скорость зависит только от разности координат реагентов в силу сдвиговой симметрии четырехцентровой вероятности.

Вывод кинетического уравнения многочастичным методом

Многочастичное рассмотрение. Суть метода в следующем. Вводятся так называемые частичные функции распределения $\phi_{pqr}(A^p, B^q, C^r, t)$ [3]. Здесь под записью A^p понимается набор векторных переменных $A_1, \dots, A_p$, где A_i – координаты i -й переменной в трехмерном пространстве. Эти функции – не что иное, как вероятностные плотности распределений. Рассмотрение ведется в термодинамическом пределе, т. е. размеры и количества частиц устремляются к бесконечности, а концентрации при этом не меняются. Понятно, что частичная функция, зависящая от одной переменной, – это концентрация данного реагента. Она не зависит от координаты, так как система пространственно однородна.

Далее строится бесконечная система уравнений, так называемых иерархических цепочек, в которой правая часть уравнений на одночастичные функции содержит двухчастичные, правая часть уравнений на двухчастичные функции содержит трехчастичные и т. д.

После этого осуществляется переход к корреляционным формам. Корреляционные

формы показывают, насколько расположение одной частицы зависит от расположения других. Например, для двухчастичной функции корреляционная форма определяется так:

$$\phi_{110}(A_1, B_1) = \phi_{100}(A_1)\phi_{010}(B_1) + \pi_{110}(A_1, B_1).$$

Если частицы движутся независимо, то корреляционная форма равна нулю. Понятно, что одночастичные корреляционные формы совпадают с функциями распределения. После такого перехода получаются рекуррентные уравнения, т. е. цепочки на корреляционные формы. Так как система уравнений бесконечна, то она не может быть решена без каких-либо приближений. Поэтому ее надо оборвать и замкнуть. Простейший способ обрыва (типичный при рассмотрении реакций в разреженных газах [5]) – это пренебрежение трехчастичными реакционными взаимодействиями в описании эволюции двухчастичных полностью коррелированных форм. В результате этого третьего шага получаются интегродифференциальные кинетические уравнения типа временной свертки, соответствующие так называемой интегральной теории встреч (IET – Integral Encounter Theory), в которой ядро (функция памяти) линейно по концентрациям реагентов. Как показано в работах [6; 7], интегральная теория встреч (аналог теории столкновений в разреженных газах), описывающая реакцию разреженного «газа» реагентов в разбавленных жидких растворах имеет, в отличие от теории столкновений, неоправданно суженный по времени интервал применимости. Для его расширения при рассмотрении реакций в жидких растворах необходим четвертый шаг – на основе выделения парных каналов при рассмотрении эволюции трехчастичных корреляционных форм (аналог процедуры Фаддеева в квантовой теории трех тел) построение приближения эффективной пары, которое приводит к модифицированной теории встреч (MET – Modified Encounter Theory) и далее в рамках бинарного приближения к окончательной, так называемой регулярной (дифференциальной), форме скоростных кинетических уравнений типа уравнений формальной химической кинетики.

Кинетические уравнения. В случае пространственно однородной системы для нашей реакции интегральная теория встреч дает замкнутое уравнение на изменение

средней концентрации реагента А следующего вида:

$$\frac{d[A]}{dt} = -[B] \int_{-0}^t \Sigma_{IET}(t-\tau)[A](\tau)d\tau + I_{IET}, \quad (2)$$

где $\Sigma_{IET}(t)$ – функция памяти интегральной теории встреч, а

$$I_{IET} = \int d^3r \hat{v} \hat{g} \left(\delta(t)[A]_0[B](p^T(r)-1) \right), \quad (3)$$

где $\hat{g}$ – пропагатор пары АВ, учитывающий как химическое, так и силовое взаимодействие; $\hat{v}$ – оператор, описывающий химическое взаимодействие; $[A]_0$ – начальная концентрация реагента А, а функция $p^T(r)$ есть не что иное, как начальная плотность распределения по относительной координате в реакционной паре. Таким образом, начальную концентрацию реагента А можно учесть, ставя задачу Коши к уравнению (4), но таким образом нельзя учесть относительное начальное распределение реагентов А и В, т. е. начальные корреляции. Их учет осуществляется при помощи функции $p^T(\vec{r})$, входящей в неоднородный член уравнения. Если же в начальный момент реагенты были распределены независимо, то второе слагаемое в уравнении (2) исчезает, и оно становится однородным.

Как уже отмечалось, интегральная теория встреч имеет очень ограниченный интервал применимости. При построении модифицированной теории встреч с целью расширения интервала применимости получается такое уравнение:

$$\frac{d[A]}{dt} = -[B] \int_{-0}^t \Sigma_{MET}(t-\tau)[A](\tau)d\tau + I_{MET}, \quad (4)$$

где

$$I_{EPA}(t) = [A]_0[B]e^{-k[B]t} \times \int d^3r d^3r_0 \ker(\hat{v}\hat{g})(r, t|r_0, 0)(p^T(r)-1).$$

Как легко видеть, оно по виду такое же, как и (2), но с другим ядром. Ядра уравнений (2) и (3) связаны соотношением

$$\Sigma_{MET}(t) = e^{-k[B]t}\Sigma_{IET}(t), \quad (5)$$

где

$$k = \int_0^\infty \Sigma_{IET}(t)dt$$

есть марковская стационарная константа скорости, используемая в формальной хи-

мической кинетике. В отличие от уравнения (2), ядро уравнения (4) нелинейно по концентрации, что легко увидеть из соотношения (5). Это значит, что кинетический коэффициент зависит от концентрации.

Уравнения (2) и (4) имеют интегродифференциальную форму. Такая форма типична для кинетических уравнений физической кинетики и неравновесной статистической механики. Однако она не является общепринятой в формальной химической кинетике. Путем тождественных преобразований при малых концентрациях реагентов уравнение (4) можно свести к дифференциальной форме, принятой в химической кинетике:

$$\frac{d[A]}{dt} = -K(t)[A](t)[B], \quad (6)$$

где

$$K(t) = -\int d\vec{r} \hat{v} \hat{g} |\delta(t) p^T(\vec{r})|. \quad (7)$$

Нетрудно показать, что функция памяти и константа скорости связаны однозначно:

$$\Sigma_{MET}(t) = dK(t)/dt.$$

Итак, один из результатов настоящей работы состоит в том, что последовательный учет силового взаимодействия привел к стандартному кинетическому уравнению (6) с константой скорости, рассчитываемой по ранее известному правилу (7). Другими словами, последовательный учет силового приближения подтвердил полученные ранее результаты.

Модель жестких сфер

Рассмотрим один из простых частных случаев – модель жестких сфер. Наша задача – понять, каким образом надо учитывать неточность частиц при последовательном подходе. Ранее результаты Смолуховского [1] и Коллинза – Кимбала [8] воспроизводились путем постановки граничных условий, не позволяющих сферам проникать друг в друга. Далее мы попробуем учесть непроникновение частиц друг в друга путем рассмотрения соответствующей потенциальной энергии.

Будем предполагать, что частицы А и В представляют собой шары с конечными радиусами. Понятно, что их центры не могут сойтись ближе, чем сумма радиусов частиц. Будем обозначать эту величину буквой R .

Считаем, что реакция происходит при контакте шаров.

Как отмечалось выше, в этом случае конечность размеров частиц можно учесть, введя энергию взаимодействия

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \geq R \\ +\infty, & r < R \end{cases}$$

Ясно, что напрямую подставить такое выражение, например, в формулу (1) не представляется возможным. Поэтому надо сначала рассмотреть конечный потенциал и затем сделать предельный переход к бесконечной стенке. Это можно сделать по крайней мере двумя способами.

Первый способ – это рассмотреть сначала конечный прямоугольный потенциал (рис. 1), а потом устремить U_0 к бесконечности. При таком рассмотрении частицы, в начальный момент времени находившиеся внутри барьера, так и будут совершать диффузионное движение внутри, пока не достигнут границы. Понятно, что такой подход не очень хорош для случая жестких шаров, так как по физике ясно, что они не могут перекрываться и проникать друг в друга.

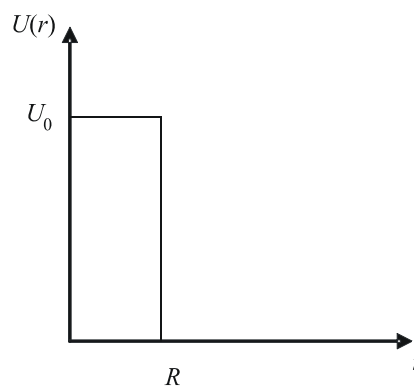


Рис. 1. Конечный прямоугольный потенциал

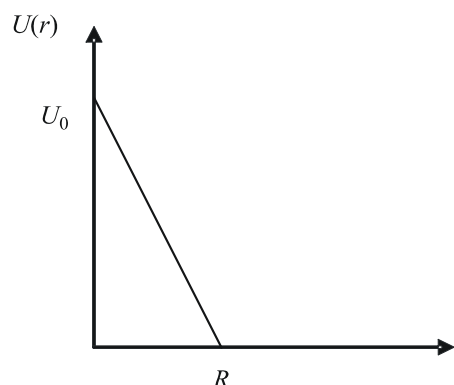


Рис. 2. Потенциал в виде «горки»

Второй способ перехода к бесконечной стенке – рассмотреть потенциал в виде «горки» (рис. 2) и тоже устремить U_0 к бесконечности, т. е. сделать «бесконечно крутую горку». В этом случае частицы, изначально находившиеся внутри барьера, бесконечно быстро с него скатятся и окажутся на границе. Этот подход более реалистичен, так как не предполагает свободного проникновения жестких шаров друг в друга.

Для нахождения выражения для константы скорости можно использовать метод функций Грина и преобразование Лапласа. Это удобно тем, что лапласовский образ ядра интегрального оператора зависит от лапласовской переменной как от параметра, и по нему нет сверток. Поэтому находится сначала лапласовский образ константы скорости, а затем восстанавливается оригинал. В результате для случая «черной сферы», соответствующей диффузионному контролю реакции, получается следующее выражение:

$$K(t) = k_D \left(1 + \sqrt{\frac{\tau_D}{\pi t}} \right) + \frac{4}{3} \pi R^3 \delta(t). \quad (8)$$

Здесь $\tau_D = R^2/D$ – диффузионное время встречи частиц; $k_D = 4\pi RD$ – диффузионная константа скорости (частота столкновений, рассчитанная на единицу концентрации); D – коэффициент взаимной диффузии. Видно, что первое слагаемое – это результат Смолуховского. Второе слагаемое содержит δ -функцию, т. е. оно бесконечно в начальный момент времени и равно нулю во все последующие. Физический смысл таков. Те частицы, которые находились изначально внутри барьера, бесконечно быстро попадают на границу и тут же реагируют на идеально тушащей сфере. Из-за этого и появляется δ -функция. Потом в реакции участвуют частицы только снаружи, и она идет по обычному закону Смолуховского.

Итак, мы получили, что рассмотрение потенциальной энергии в виде барьера не приводит к результату Смолуховского: в уравнении (8) содержится добавочное слагаемое. Причина в том, что мы предполагали, что в начальный момент центры частиц А и В распределены совершенно независимо друг от друга, в частности могут и перекрываться. Но в реальных системах такое невозможно, т. е. невозможно приготовить такое начальное состояние системы, чтобы

абсолютно жесткие шары перекрывались. Это значит, что уже в начальный момент частицы распределены не совсем независимо, а значит, для корректного рассмотрения задачи с жесткими сферами необходимо учитывать начальные корреляции.

Рассмотрим еще один частный случай – большие времена, т. е. $t \rightarrow \infty$, но сфера «серая», т. е. скорость поглощения конечна. Для этого случая имеем:

$$K(t) = \frac{kk_D}{k + k_D} \left(1 + \frac{kk_D}{k + k_D} \frac{1}{4\pi D \sqrt{\pi D t}} \right). \quad (9)$$

Здесь k – константа скорости элементарного акта рекомбинации. Она зависит от структуры реагентов и их химической активности. Из этой формулы легко видеть, что стационарная константа скорости (т. е. главный

член) равна $\frac{kk_D}{k + k_D}$. В работе [9] была также

сформулирована общая теорема, суть которой в следующем. Если для реакции $A + B \rightarrow$ продукты в жидком растворе стационарная константа скорости равна k^* , то следующий член разложения по времени определяется той же самой величиной k^* и

равен $\frac{k^{*2}}{4\pi D \sqrt{\pi D t}}$. Из формулы (9) видно, что

в рассматриваемом нами случае эта теорема выполняется.

Теория встреч при наличии однопипных начальных корреляций

Выше в рамках теории встреч был рассмотрен случай жестких сфер при отсутствии начальных корреляций, т. е. предполагалось, что в начальный момент времени частицы А и В имеют абсолютно независимые друг от друга координаты и центры шаров могут находиться на любом расстоянии друг от друга. Формула (8) вторым слагаемым учитывает изначальную возможность сближения шаров на расстояние меньше их суммарного радиуса и последующее мгновенное выбрасывание на границу барьера. Поскольку выброс является бесконечно быстрым, то этот процесс можно рассматривать как способ приготовления нового начального состояния системы. В результате вероятность того, что в произвольно взятой паре в новый начальный момент времени расстояние между частицами равно R , больше, чем соответствующая вероятность при $r > R$. И из-за этого вектор

относительной координаты распределен неравномерно уже в новый начальный момент времени.

Предельный переход к твердым сферам порождает источник, который связан с начальным перекрытием сфер. Наличие самого перекрытия обусловлено такой постановкой начальных условий, при которой полностью игнорируются начальные корреляции. Возникает необходимость их учета. Иными словами, в последовательно построенной нами теории встреч рассмотрение реагентов с твердой сердцевиной является неправомочным. Поэтому необходимо строить теорию, учитывающую начальные корреляции.

Возникает вопрос, какой класс функций, учитывающий начальные корреляции, необходимо рассматривать, чтобы переход к твердым сердцевинам давал физически правильные результаты, в частности воспроизводил результат теории Смолуховского. Очевидно, что если предполагать изначальную невозможность перекрывания частиц, то при предельном переходе к бесконечному барьеру в системе не будет никаких мгновенных изменений координат частиц. Поэтому можно рассмотреть начальную условную вероятность следующего вида:

$$p^T(r) = \varphi(r)e^{-\frac{U(r)}{kT}},$$

где $\varphi(r)$ – произвольная достаточно гладкая функция, не зависящая от интенсивности потенциальной энергии U_0 , которая будет устремляться к бесконечности. Равновесному распределению отвечает случай $\varphi(r) = 1$.

Рассмотрим ту же самую модель жестких сфер, но будем предполагать наличие начальных корреляций такого типа:

$$\begin{cases} p^T(r) = \varphi(r), & r > R \\ p^T(r) = 0, & r \leq R \end{cases}.$$

Тогда для случая «черной» сферы константа скорости имеет вид

$$K(t) = k_D + \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \left(\frac{k_D^2}{4\pi D^{3/2}} + 4\pi R^2 (\varphi(R) - 1) \sqrt{D} \right). \quad (10)$$

В частности, при $\varphi = 1$ из (10) следует теория Смолуховского. Видно, что в начальный

момент времени константа скорости имеет особенность вида $t^{-1/2}$. Ее физическая причина состоит в том, что те частицы, которые находились очень близко друг к другу, встретятся почти сразу после начала движения, а те, что находились в контакте, прореагируют мгновенно.

В случае «серой» сферы на больших временах нет качественных отличий от случая «черной» сферы. Чтобы узнать поведение константы на больших временах, необходимо в формуле (10) заменить k_D на

$$\frac{kk_D}{k + k_D}.$$

Иная ситуация в случае малых времен. Главный член константы скорости будет таким: $K(t) = k\varphi(R) = \text{const}$. Итак, для «серой» сферы константа скорости не имеет в нуле особенностей (и вообще их не имеет). Физически это также очевидно. Действительно, даже если в начальный момент времени частицы находились в непосредственном контакте друг с другом, то бесконечно быстрой реакции не будет именно из-за «серости» сферы.

Выводы

1. На примере реакции $A + B \rightarrow C + B$ проведен последовательный учет силового взаимодействия между реагентами в многочастичной постановке задачи. Построено немарковское кинетическое уравнение теории встреч. Установлена его тождественность с функцией памяти, полученной в литературе из физических соображений.

2. На основе полученного немарковского кинетического уравнения рассмотрена задача Смолуховского о приконтактной реакции между твердыми сферами. Обнаруженному новому дополнительному вкладу в константу скорости дана прозрачная интерпретация. В результате было установлено, что для реагентов с твердой сердцевиной необходимо учитывать наличие начальных корреляций между ними.

3. Сформулирован класс начальных условий, допускающий корректный переход к рассмотрению реагентов с твердой сердцевиной. Установлена идентичность полученных выражений для константы скорости с известными результатами Смолуховского и Коллинза – Кимбала.

Список литературы

1. *Smoluchowski M.* Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider // *Z. Phys. Chem.* 1917. Vol. 92. P. 129.
2. *Waite T. R.* Theoretical Treatment of the Kinetics of Diffusion-Limited Reactions // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 107. No. 2. P. 463–470.
3. *Igoshin O. A., Kipriyanov A. A., Doktorov A. B.* Many-Particle Treatment of Nonuniform Reacting Systems $A + B \rightarrow C$ and $A + B \rightarrow C + D$ in Liquid Solutions // *Chem. Phys.* 1999. Vol. 244. No. 2–3. P. 371–385.
4. *Kipriyanov A. A., Igoshin O. A., Doktorov A. B.* The Effect of Chemical Displacement of B Species in the Reaction $A + B \rightarrow B$ // *Physica A.* 2000. Vol. 275. No. 1–2. P. 99–133.
5. *Ivanov K. L., Lukzen N. N., Doktorov A. B., Burshtein A. I.* Integral Encounter Theories of Multistage Reactions // *I. Kinetic Equations.* 2001. Vol. 114. No. 4. P. 1754–1762.
6. *Doktorov A. B., Kipriyanov A. A.* Non-Markovian Kinetics Equations of Dissociation and Reversible Reactions $A + B \leftrightarrow C$ in Solutions // *Physica A.* 2003. Vol. 317. No. 1–2. P. 41–62.
7. *Kipriyanov A. A., Doktorov A. B.* General Kinetics Laws of Dissociation and Reversible Reaction $A + B \leftrightarrow C$ in Solutions // *Physica A.* 2003. Vol. 317. No. 1–2. P. 63–82.
8. *Collins F. G., Kimbal G. E.* Diffusion-Controlled Reaction Rates // *J. Colloid Sci.* 1949. Vol. 4. No. 4. P. 425–437.
9. *Kipriyanov A. A., Doktorov A. B.* T-matrix Representation and Long Time Behavior of Observables in the Theory of Migration-Influenced Irreversible Reactions in Liquid Solutions // *Physica A.* 1996. Vol. 230. No. 1–2. P. 75–117.

Материал поступил в редколлегию 15.05.2007

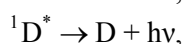
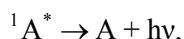
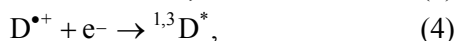
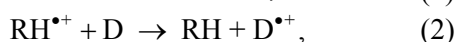
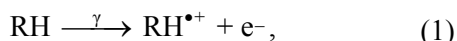
**ВРЕМЯРАЗРЕШЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ МИКРОВОЛНОВОГО ПОЛЯ
В РЕКОМБИНАЦИОННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ГЕКСАНОВЫХ
РАСТВОРОВ 1,2-ДИФЕНИЛИНДОЛА ***

Обнаружено, что при увеличении концентрации 1,2-дифенилиндола в гексане происходит качественная трансформация кривых эффекта микроволнового поля в рекомбинационной флуоресценции. Путем сравнения результатов численного расчета с экспериментом оценены параметры реагирующих частиц.

Ключевые слова: радиационный трек, ион-радикальная пара, спиновое состояние, геминальная рекомбинация, спиновая корреляция, спиновая релаксация, эффект магнитного поля, эффект микроволнового поля.

Введение

В жидких углеводородах (RH) под действием ионизирующих излучений в присутствии акцепторов электронов (A) и акцепторов положительно заряженных дырок (D) происходят следующие основные процессы [1; 2]:



приводящие к образованию различных синглетных спин-коррелированных пар ($\text{RH}^{\bullet+}/e^-$), ($\text{RH}^{\bullet+}/\text{A}^{\bullet-}$), ($\text{D}^{\bullet+}/e^-$), ($\text{D}^{\bullet+}/\text{A}^{\bullet-}$) и их рекомбинации. Образующиеся в результате рекомбинации синглетно возбужденные молекулы (${}^1\text{A}^*$ и ${}^1\text{D}^*$) высвечивают квант света, который фиксируется аппаратурой.

Триплетно возбужденные молекулы (${}^3\text{A}^*$ и ${}^3\text{D}^*$) обладают обычно значительно более низким квантовым выходом люминесценции, нежели синглетно возбужденные, поэтому их вкладом в общее свечение можно пренебречь. Кроме того, триплетно возбуж-

денные молекулы светят в другой спектральной области, чем синглетные. Поэтому можно легко сделать так, что их свечение не воспринимается аппаратурой. Таким образом, интенсивность регистрируемой люминесценции пропорциональна вероятности образования в результате рекомбинации синглетно-возбужденных молекул.

Влияние магнитного поля на рекомбинационную люминесценцию вызвано спиновой эволюцией в геминальных парах и зависимостью выхода люминесценции от мультиплетности возбужденной молекулы, образующейся в результате рекомбинации. Существенной особенностью неполярных растворов является то, что при ионизации начальное расстояние в парах (обычно ~ 5–6 нм) значительно меньше радиуса Онзагера (~30 нм для алканов при комнатной температуре). Поэтому значительная часть пар рекомбинирует геминально, т. е. со своим материнским противоионом. При ионизации молекулы – реакция (1) – спин выбитого электрона не изменяет своего состояния. А так как в молекуле спины были спарены, то начальное спиновое состояние геминальной пары всегда синглетное. При передаче заряда на акцептор – реакции (2) и (3) – и непосредственно при рекомбинации зарядов – реакции (4), (5) и (6) – также не происходит изменения спинового состояния. Таким образом, мультиплетность образовавшейся в процессе рекомбинации возбужденной молекулы оп-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-03-32801).

ределяется мультиплетностью пары непосредственно перед рекомбинацией. Следовательно, мультиплетность возбужденной молекулы определяется спиновой эволюцией геминальной ион-радикальной пары с момента ионизации до рекомбинации. Постоянные или переменные магнитные поля оказывают существенное влияние на эту эволюцию. А так как излучают синглетно возбужденные молекулы, то влияние магнитных полей на спиновое состояние пары непосредственно отражается на интенсивности рекомбинационной люминесценции.

Временная зависимость интенсивности рекомбинационной флуоресценции $I(t)$ описывается следующим выражением:

$$I(t) = \frac{1}{\tau_f} \int_{-\infty}^t d\xi \Phi(t-\xi) \int_{-\infty}^{\xi} d\eta e^{\left(\frac{\xi-\eta}{\tau_f}\right)} \times \quad (7)$$

$$\times \int_{-\infty}^{\eta} G(\zeta) f(\eta-\zeta) r_{ss}(\eta-\zeta) d\zeta,$$

где τ_f , $\Phi(t)$, $G(t)$ и $f(t)$ – это время флуоресценции, приборная функция временного разрешения, функция генерации ион-радикальных пар и кинетика рекомбинации соответственно. Временная зависимость населенности синглетного состояния ион-радикальных пар

$$r_{ss}(t) = \frac{1}{4}(1-\theta) + \theta \cdot \rho_{ss}(t),$$

где $\rho_{ss}(t)$ – населенность синглетного состояния спин-коррелированных геминально рекомбинирующих пар; θ – доля спин-коррелированных пар. Зависимость интенсивности рекомбинационной флуоресценции от постоянных или переменных магнитных полей целиком определяется влиянием магнитного поля на $\rho_{ss}(t)$. При перекрестных рекомбинациях в шпоре доля синглетных состояний всегда равна $\frac{1}{4}$, так как при такой рекомбинации отсутствует спиновая корреляция. В работе [3] было показано, что при рекомбинации в многочастичном треке доля геминальных рекомбинаций быстро (за несколько пикосекунд) выходит на плато. Поэтому при анализе магнитных эффектов можно пользоваться только одним числом – долей спин-коррелированных пар θ . На долю спин-коррелированных пар могут влиять также релаксационные процессы.

При облучении жидких неполярных растворов практически все время с момента иони-

зации до рекомбинации партнеры пары находятся на значительном расстоянии друг от друга (десятки нанометров), так как при их сближении до расстояния порядка 1–2 нм происходит практически мгновенная рекомбинация. Поэтому диполь-дипольным и обменным взаимодействием между партнерами пары всегда можно пренебречь. Спиновая эволюция определяется взаимодействием электронного спина со спинами ядер (сверхтонкое взаимодействие), с внешними магнитными полями и процессами спиновой релаксации.

Сверхтонкое взаимодействие с магнитными ядрами приводит к тому, что синглетное состояние становится нестационарным и возникают переходы между S и T_0 состояниями системы с частотой, пропорциональной разности резонансных частот партнеров пары (рис. 1) Это приводит к периодическому изменению населенности синглетного состояния и как следствие к осцилляциям в кинетике рекомбинационной люминесценции. Эти осцилляции носят название квантовых биений и давно уже наблюдаются в эксперименте [4–7].

Наложение резонансного поля СВЧ также приводит к осцилляциям в кинетике люминесценции вследствие вынужденных переходов между T_0 и T_+ , а также T_0 и T_- триплетными состояниями с частотой ω_1 , пропорциональной амплитуде резонансного СВЧ-поля B_1 , как показано на рис. 1. Квантовые осцилляции в кинетике рекомбинационной флуоресценции, возникающие вследствие таких переходов, наблюдались в работах [8; 9].

В работе [10] были выяснены условия для наилучшего наблюдения индуцированных СВЧ квантовых осцилляций. Оказалось, что они наиболее ярко проявляются в случае, когда спектр ЭПР одного из партнеров пары очень широкий, что обеспечивает высокую скорость $S-T_0$ переходов. А спектр ЭПР другого партнера должен быть, наоборот, достаточно узкий. В этом случае появляется возможность при достаточно большой амплитуде микроволнового поля эффективно осуществить T_+-T_0 и T_--T_0 переходы. В этой работе впервые были экспериментально зарегистрированы проявления спин-локинга во время разрешенных эффектах микроволнового поля. Спин-локинг проявляется при больших амплитудах резонансного поля СВЧ торможением $S-T_0$ переходов. Также были выведены аналитические формулы для временной зависимости населенности синглетного состояния пары в

предельных случаях малого и большого расщепления в спектре ЭПР рекомбинирующих ион-радикалов. В работе [11] было получено точное аналитическое решение задачи с учетом спиновой релаксации.

В работе [12] была подробно рассмотрена концентрационная зависимость эффектов СВЧ-поля в растворах, содержащих гексафторбензол. Путем сравнения экспериментальных кривых эффекта СВЧ с теоретическим расчетом были получены данные о маршруте реакции спин-молекулярной перезарядки, численных значениях констант этих реакций. В этом случае не происходит качественной трансформации кривых эффекта СВЧ, так как из-за широкого спектра ЭПР анион-радикалов гексафторбензола всегда выполняется условие большого расщепления, поэтому не происходит качественной трансформации кривых эффекта СВЧ и всегда наблюдаются индуцированные СВЧ квантовые осцилляции при отсутствии эффекта спин-локинга.

Настоящая работа посвящена исследованию эффектов микроволнового поля в случае, когда изменение концентрации акцептора приводит к качественному изменению кривых. А именно, при увеличении концентрации происходит трансформация из режима квантовых осцилляций в режим спин-локинга.

Техника эксперимента и методика расчета

Для проведения экспериментов использовалась установка, изготовленная на основе наносекундного рентгеновского флуориметра [13], работающего в режиме счета отдельных фотонов. Она была подробно описана в работе [10]. Описание СВЧ-системы дано в работе [14]. Основные параметры установки: временное разрешение – 3 нс, магнитное поле B_1 в образце – до 1,2 мТл при неоднородности не более 10 %. Здесь и далее под B_1 подразумевается поле во вращающейся системе координат. Частота колебаний микроволнового поля была около 2,5 ГГц. Резонансное поле во всех экспериментах было около 88,3 мТл, что соответствует g -фактору свободного электрона.

С целью очищения *n*-гексан (99 %, «Реактив») многократно обрабатывался концентрированной серной кислотой, смесью концентрированных серной и азотной кислот, отмывался водой и после перегонки

осушался над CaCl_2 . Затем пропускался через колонку с активированным Al_2O_3 . Критерием чистоты растворителя служила оптическая плотность, которая на длине волны 200 нм не превышала единицы для всех экспериментов. С помощью газовой хроматографии было установлено, что в очищенном таким образом *n*-гексане содержатся 2-метилпентан и 3-метилпентан в количестве 0,2 и 0,5 % соответственно. Других примесей (вплоть до 0,05 %) обнаружено не было. *n*-Терфенил- d_{14} и 1,2-дифенилиндол (Aldrich) дополнительной очистке не подвергались. Образцы обезгаживались многократными циклами перемораживания и откачки. Все эксперименты проводились при температуре 283 ± 1 К.

В работе [12] был разработан метод численного расчета населенности синглетного состояния радикальной пары с учетом микроволнового поля, сверхтонкого взаимодействия, спиновой релаксации и реакций, приводящих к изменению ядерного окружения, например процессов ион-молекулярной перезарядки между одинаковыми молекулами. Такие процессы могут происходить многократно за время до рекомбинации. Кроме этого, возможны также процессы переноса заряда на молекулу другого вещества. Зачастую такие процессы необратимы, так как происходят с выделением энергии. Поэтому за время эволюции пары такой процесс может произойти лишь однократно.

При использовании расчетных формул из [12] нужно учесть, однако, что в них присутствуют две опечатки. В формуле (25) этой работы вместо $1/F$ должно быть τ_0/F . Также должно быть $q = \omega_1 I_0 (a - s) / \tau_0$ (в работе [12] в этой формуле вместо a ошибочно стоит b).

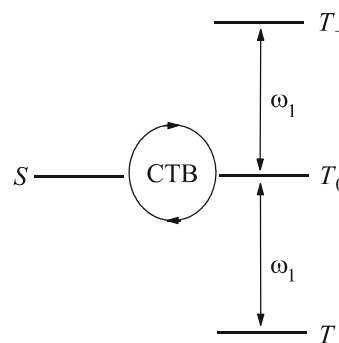


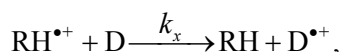
Рис. 1. Спиновая динамика в геминальной ион-радикальной паре

На рис. 2 приведен пример модельного численного расчета с учетом реакций перезарядки. Эффект микроволнового поля вычислялся по формуле:

$$\chi(t) = \frac{r_{ss}^{mw}(t)}{r_{ss}^0(t)} - 1 = \frac{\theta(\rho_{ss}^{mw}(t) - \rho_{ss}^0(t))}{\frac{1}{4}(1 - \theta) + \theta\rho_{ss}^0(t)}, \quad (8)$$

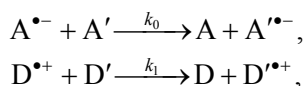
где $\rho_{ss}^{mw}(t)$ – населенность синглетного состояния спин-коррелированных геминально рекомбинирующих пар в микроволновом поле; $\rho_{ss}^0(t)$ – без микроволнового поля.

В расчете предполагалось, что электрон мгновенно захватывался на молекулу акцептора А с образованием анион-радикала $A^{\bullet-}$. При этом спектр ЭПР анион-радикала представлял собой неразрешенную неоднородно уширенную линию с шириной (между точками максимального наклона) 1 мТл. Передача заряда с дырки $RH^{\bullet+}$ на молекулу акцептора D осуществлялась в ходе реакции:



где величина k_x полагалась равной $10^{10} \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$.

Считалось, что $D^{\bullet+}$ имеет такой же спектр ЭПР, как и $A^{\bullet-}$. Также в расчете учитывались реакции перезарядки как положительного, так и отрицательного заряда:



где считалось, что $k_0 = k_1 = k_x = 10^{10} \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$. При расчете предполагалось, что для всех частиц времена собственной релаксации (не связанной с процессами ион-молекулярного обмена) равны: спин-решеточной – $T_1 = 1 \text{ мкс}$, спин-спиновой – $T_2 = 0,2 \text{ мкс}$.

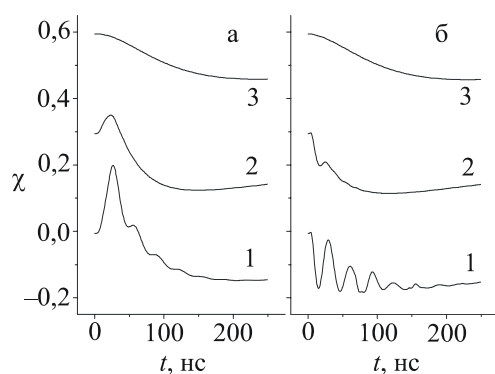


Рис. 2. Численный расчет эффектов микроволнового поля с учетом ион-молекулярной перезарядки с узким (а) и широким (б) спектром ЭПР дырки растворителя. Концентрация акцепторов 10^{-3} М (1), 10^{-2} М (2), 10^{-1} М (3). $B_1 = 1,1 \text{ мТл}$, $\Theta = 0,3$

Как видно (рис. 2, а), при узком спектре ЭПР дырки растворителя (синглетная линия) при данных значениях параметров и при не очень больших концентрациях акцепторов наблюдается эффект спин-локинга. С увеличением концентрации акцептора амплитуда эффекта падает. Когда концентрация становится достаточно большой (в нашем случае это 0,1 М), для того чтобы спектр ион-радикалов стал однородным вследствие ион-молекулярной перезарядки, спиновая эволюция определяется исключительно релаксационными процессами. В этом случае эффект спин-локинга исчезает.

Если дырка имеет широкий спектр ЭПР (неоднородно уширенная линия с шириной между точками максимального наклона 5 мТл), то при низкой концентрации акцептора (10^{-3} М) наблюдаются индуцированные СВЧ квантовые осцилляции, спадающие со временем из-за релаксации и перехвата положительного заряда на акцептор (рис. 2, б). При увеличении концентрации акцептора амплитуда осцилляций резко спадает и возрастает скорость их затухания. При данном выборе значений параметров эффект спин-локинга практически не проявляется.

Результаты и обсуждение

В качестве акцептора электронов и дырок нами использовался 1,2-дифенилиндо́л (DPI), спектр ОД ЭПР (оптически детектируемый ЭПР) которого приведен на рис. 3. Спектр является наложением линий катион- и анион-радикалов DPI. 1,2-Дифенилиндо́л является хорошим акцептором как положительного, так и отрицательного заряда, имеет большой квантовый выход (0,9) и короткое время (2 нс) флуоресценции, а также высокую растворимость.

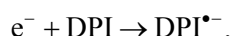
На рис. 4, а тонкими непрерывными линиями приведены результаты экспериментов для растворов 1,2-дифенилиндо́ла в гексане при $B_1 = 1,12 \text{ мТл}$. Эффект микроволнового поля вычислялся следующим образом:

$$\chi(t) = \frac{I_{mw}(t)}{I_0(t)} - 1, \quad (9)$$

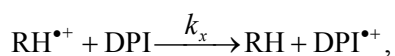
где $I_{mw}(t)$ – интенсивность флуоресценции в присутствии СВЧ-поля, а $I_0(t)$ – в отсутствие. Как видно из формулы (7), при достаточно хорошем временном разрешении установки и коротком времени высвечивания люминофора, когда $I(t) \approx f(t)r_{ss}(t)$, формула (9) совпадает с формулой (8), по которой идет теоретический расчет.

Как видно из рисунка, при концентрации DPI 10^{-3} М наблюдаются индуцированные СВЧ квантовые осцилляции, амплитуда которых быстро падает со временем. Наличие этих осцилляций свидетельствует о широком спектре ЭПР у катион-радикала растворителя. При повышении концентрации DPI до 10^{-2} М осцилляции исчезают и наблюдается форма кривой эффекта СВЧ, типичная для появления спин-локинга. При дальнейшем увеличении концентрации DPI до $7 \cdot 10^{-2}$ М эффект спин-локинга сохраняется при существенном уменьшении амплитуды. Однако эффект не пропадает совсем, как это можно было ожидать на основании модельных численных расчетов (см. рис. 2).

Для объяснения результатов эксперимента были проделаны численные расчеты спиновой динамики с учетом релаксации и ион-молекулярной перезарядки. В расчетах предполагался мгновенный захват электрона на молекулу 1,2-дифенилиндола:



Учитывалась также передача положительного заряда с дырки растворителя на молекулу 1,2-дифенилиндола с константой k_x



а также перенос положительного и отрицательного заряда с одной молекулы DPI на другую:



Константы скорости реакции для этих процессов предполагались равными.

На рис. 4 жирными линиями показаны результаты численных расчетов. Используя в этих расчетах значения параметров, при которых удалось добиться наилучшего соответствия с экспериментом, приведены ниже:

Параметр	Концентрация, М		
	10^{-3}	10^{-2}	$7 \cdot 10^{-2}$
T_1 , нс	450	350	250
T_2 , нс	140	140	140
ΔB_{pp} , мТл	0,9	0,7	0,45
T_1^{RH} , нс	200		
T_2^{RH} , нс	60		
$\Delta B_{pp}^{\text{RH}}$, мТл	4,5		
k_1 , $\text{M}^{-1}\text{c}^{-1}$	$2 \cdot 10^9$		
k_x , $\text{M}^{-1}\text{c}^{-1}$	$6,6 \cdot 10^{10}$		
Θ	0,2		

Предполагалось для простоты, что катион- и анион-радикалы DPI имеют одинаковый неоднородно уширенный спектр ЭПР с шириной ΔB_{pp} (расстоянием между точками максимального наклона). Хотя из формы линии в спектре ОД ЭПР 1,2-дифенилиндола (см. рис. 3) можно предположить, что линии катион- и анион-радикалов имеют слегка разную ширину, эта небольшая разница не является существенной при симулировании кривых эффекта СВЧ. Также предполагалось, что у катион- и анион-радикалов DPI равны как время T_1 – спин-решеточной, так и время T_2 – спин-спиновой релаксации.

Подбором параметров удается добиться хорошего соответствия между экспериментом и расчетными кривыми. Причем произвол при подборе параметров не очень велик, так как изменение разных параметров вызывает различную трансформацию расчетных кривых. Кроме того, одним набором параметров необходимо описать экспериментальные кривые при существенно различающихся условиях.

Для корректного описания эксперимента приходится уменьшать ширину линии DPI при повышении концентрации акцептора. Это связано с процессами димеризации и кластеризации. При диффузионно-дрейфовом движении ион-радикал встречается с молекулами акцептора, при этом может образоваться димерный ион-радикал. В дальнейшем к нему могут присоединиться другие молекулы. Скорость процесса кластеризации очевидно возрастает при повышении концентрации акцепторов. Кроме того, при повышении концентрации равновесие сдвигается в сторону больших кластеров. Также в растворе могут существовать димерные молекулы акцептора. При повышении концентрации их количество возрастает.

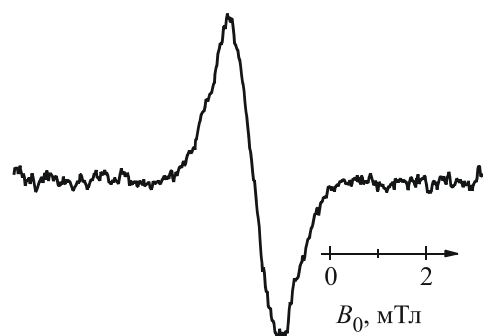


Рис. 3. Спектр ОД ЭПР раствора 10^{-3} М 1,2-дифенилиндола в н-гексане

тает. В силу этих причин при повышении концентрации димерные и многомерные ион-радикалы оказывают большее влияние на результаты эксперимента. А так как ширина спектра ЭПР у них меньше, чем у мономерных ион-радикалов, то в расчете приходится с повышением концентрации уменьшать для 1,2-дифенилиндола параметр ΔB_{pp} .

На рис. 5 приведены те же экспериментальные кривые (тонкие зашумленные линии) и теоретические (жирные линии), что и на рис. 4, для двух концентраций акцепторов. А кроме этого приведены результаты расчетов с другими значениями параметров. Расчетные кривые (рис. 5, а) соответствуют значениям k_1 , равным 10^9 (кривая 1), $4 \cdot 10^9$ (кривая 2) и $2 \cdot 10^9 \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$ (кривая 3). Причем при расчете этих кривых производилось варьирование остальных параметров для того, чтобы добиться наилучшего согласия с экспериментом. Для аппроксимации экспериментальных данных при высоких концентрациях акцепторов приходится использовать очень низкие значения констант скорости k_1 для реакций ион-молекулярного переноса заряда (10) и (11). Причем даже увеличение k_1 с $2 \cdot 10^9$ до $4 \cdot 10^9 \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$, что также является довольно низким значением для гексановых растворов, вызывает существенное отклонение расчетной кривой от экспериментальной, как видно из рис. 5, а. Для объяснения этого факта следует учитывать, что реакции перезарядки (10) и (11) и соответственно

величина k_1 существенно влияли бы на ход кривой эффекта СВЧ лишь при наибольшей концентрации акцепторов. Однако при высокой концентрации, как следует из работы [15], могут происходить более сложные процессы с ион-радикалами. Вокруг ион-радикалов образуются кластеры из молекул акцептора. Спиновая плотность динамически перераспределяется между молекулами кластера в ходе его теплового движения. Это вызывает необычную спиновую релаксацию (следствием этого является то, что при увеличении концентрации акцепторов приходится уменьшать время спин-решеточной релаксации ион-радикалов DPI. Реакции же (10) и (11) при высоких концентрациях в реальности не оказывают существенного влияния на форму кривых. Поэтому мы в наших расчетах вынуждены использовать существенно заниженные значения константы скорости.

Следствием упомянутых выше процессов является также сохранение эффекта спин-локинга при высокой концентрации акцептора. Аналогичные явления наблюдались в работе [16], в которой спин-локинг в стационарном ОД ЭПР эксперименте наблюдался при высоких концентрациях бифенила- d_{10} , бифенила- $-h_{10}$, нафталина- $-d_8$ и нафталина- $-h_8$ в различных растворителях, что было бы невозможно из-за ион-молекулярной перезарядки вследствие превращения спектра ЭПР ион-радикалов в однородно уширенную линию частотным обменом.

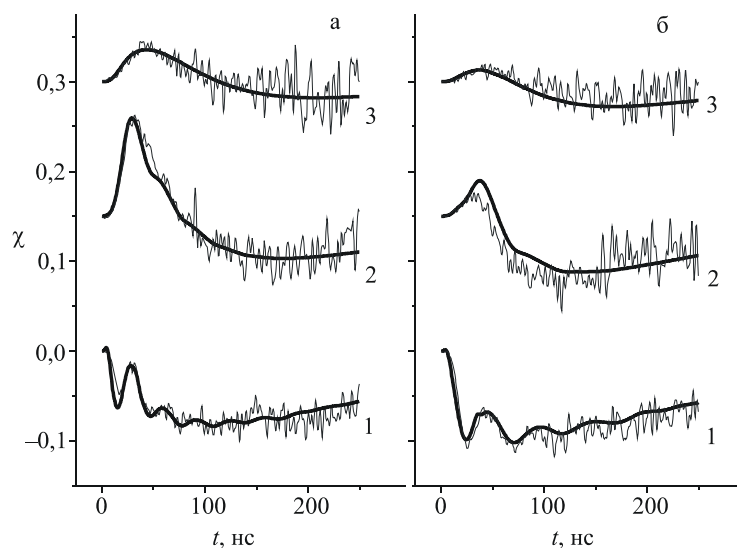


Рис. 4. Экспериментально наблюдаемый эффект микроволнового поля в рекомбинационной флуоресценции гексановых растворов 10^{-3} М (1), 10^{-2} М (2), $7 \times 10^{-2} \text{ М}$ (3) 1,2-дифенилиндола при $B_1 = 1,12 \text{ мТл}$ (а) и $0,72 \text{ мТл}$ (б) (тонкие зашумленные линии)

На рис. 5, б приведены расчетные кривые при различных значения константы скорости захвата положительного заряда с катион-радикала растворителя на акцептор k_x , равной 10^{10} (кривая 1), $4 \cdot 10^{10}$ (кривая 2) и $6,6 \cdot 10^{10}$ (кривая 3). Остальные параметры также варьировались для наилучшего согласия с экспериментом. При низких концентрациях акцептора эффект СВЧ-поля более чувствителен к параметрам катион-радикала растворителя, а также к k_x – константе скорости передачи положительного заряда с ион-радикала растворителя на акцептор. Численное значение k_x , при котором расчет наилучшим образом соответствует эксперименту, оказалось равным $6,6 \cdot 10^{10} \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$. При более низких значениях k_x наблюдается существенное расхождение между теорией и экспериментом, как видно из рис. 5, б.

На рис. 6 изображены экспериментальные кривые временной зависимости эффекта СВЧ-поля гексановых растворов 10^{-3} М 1,2-дифенилиндола, 10^{-4} М 1,2-дифенилиндола и 10^{-4} М *n*-терфенила- d_{14} , а также кривые теоретического расчета. Численные значения параметров для кривой 1 см. в табл. Для кривых 2 и 3: $\theta = 0,14$, время спи-спиновой релаксации для катион радикала растворителя $T_2^{\text{RH}} = 10 \text{ нс}$. Времена релаксации ион-радикалов *n*-терфенила- d_{14} для кривой 3: $T_1^{\text{RTP}} = 550 \text{ нс}$, $T_2^{\text{RTP}} = 60 \text{ нс}$.

Оказалось, что для аппроксимации экспериментальных кривых при концентрации акцепторов 10^{-3} и 10^{-4} М приходится использовать существенно различные значения времен спин-спиновой релаксации T_2^{RH} (60 нс для концентрации 10^{-3} М и 10 нс для концентрации 10^{-4} М) для катион-радикалов растворителя, а также величину доли спин-коррелированных пар θ (0,14 вместо 0,2). На рис. 6 изображена расчетная кривая, наилучшим образом аппроксимирующая эксперимент (в этом случае также варьировались все параметры) при концентрации 1,2-дифенилиндола 10^{-3} М при $T_2^{\text{RH}} = 10 \text{ нс}$. Как видно, в этом случае наблюдается существенное расхождение между теорией и экспериментом. По-видимому, фазовая релаксация катион-радикалов растворителя вызвана совокупностью процессов: собственно спин-спиновой релаксацией и, возможно, некоторой химической реакцией, например реакцией распада. При повышении концентрации захват на акцептор кон-

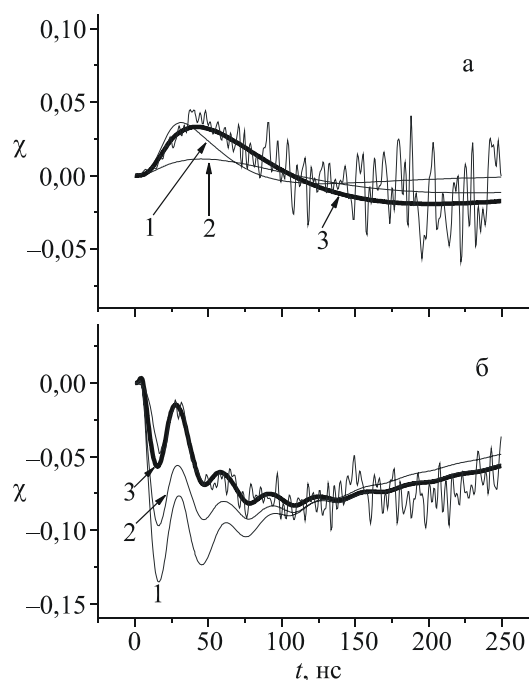


Рис. 5. Экспериментальные кривые эффекта микроволнового поля раствора $7 \cdot 10^{-2}$ (а) и 10^{-3} М (б) 1,2-дифенилиндола в н-гексане (тонкие зашумленные линии) и теоретические кривые при различных значениях параметров. $B_1 = 1,12 \text{ мТл}$

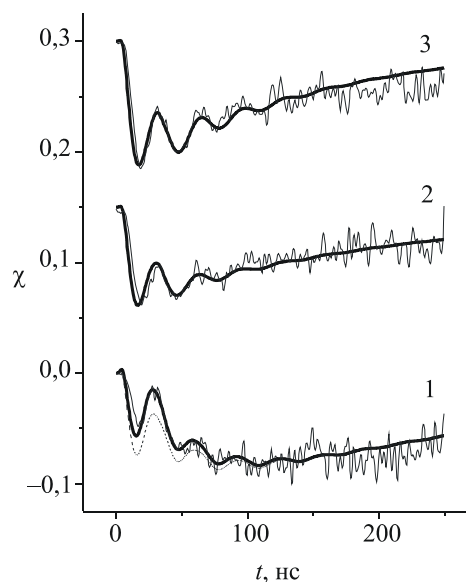


Рис. 6. Экспериментально наблюдаемый эффект микроволнового поля (тонкие зашумленные линии) для гексановых растворов 10^{-3} (1), 10^{-4} М 1,2-дифенилиндола (2) и 10^{-4} М *n*-терфенила- d_{14} (3). Жирные линии – теоретический расчет. Пунктирная линия – наилучшая аппроксимация для кривой 1 при $T_2^{\text{RH}} = 10 \text{ нс}$

курирует с реакцией. При этом мы наблюдаем эффективное увеличение T_2 . Но для того чтобы подобное происходило, необходимо, чтобы кинетика реакции была неэкспоненциальна.

Список литературы

1. Brocklehurst B. Spin correlation effects in radiolysis // Intern. Rev. Phys. Chem. 1985. Vol. 4. No. 3. P. 279–306.

2. Brocklehurst B. Spin correlation and magnetic field effects in radiolysis // Radiat. Phys. Chem. 1997. Vol. 50. No. 3. P. 213–225.

3. Lozovoy V. V., Anishchik S. V., Medvedev N. N. et al. Monte Carlo modelling of radical ion recombination in multiparticle tracks // Chem. Phys. Lett. 1990. Vol. 167. No. 1, 2. P. 122–128.

4. Klein J., Voltz R. Time-resolved optical detection of coherent spin motion for organic-radical-ion pairs in solution // Phys. Rev. Lett. 1976. Vol. 36. No. 20. P. 1214–1217.

5. Klein J., Voltz R. Time resolved magnetic modulation of ion recombination in organic solutions: spin motion in radical ion pairs // Canadian Journal of Chemistry. 1977. Vol. 55. No. 11. P. 2102–2106.

6. Anisimov O. A., Bizyaev V. L., Lukzen N. N. et al. The induction of quantum beats by hyperfine interactions in radical-ion pair recombination // Chem. Phys. Lett. 1983. Vol. 101. No. 2. P. 131–135.

7. Veselov A. V., Melekhov V. I., Anisimov O. A. et al. The induction of quantum beats by the Δg -mechanism in radical ion pair recombination // Chem. Phys. Lett. 1987. Vol. 136. No. 3, 4. P. 263–266.

8. Saik V. O., Anisimov O. A., Koptug A. V. et al. Quantum beats in singlet-triplet transitions of radical pairs induced by a radio-frequency field // Chem. Phys. Lett. 1990. Vol. 165. No. 2, 3. P. 142–145.

9. Shkrob I. A., Trifunac A. D. Magnetic resonance and spin dynamics in radical ion pairs: Pulsed time-resolved fluorescence detected magnetic resonance // J. Chem. Phys. 1995. Vol. 103. No. 2. P. 551–561.

10. Anishchik S. V., Borovkov V. I., Ivanikov V. I. et al. Microwave field effects on the time dependence of recombination fluorescence from non-polar solutions // Chem. Phys. 1999. Vol. 242. P. 319–330.

11. Anishchik S. V., Verkhovlyuk V. N., Bagryansky V. A. Time evolution of the spin state of the radical ion pair in the microwave field: an analytical solution // J. Phys. B. 2006. Vol. 39. P. 2231–2246.

12. Morozov V. A., Gorelik E. V., Lukzen N. N. et al. Manifestation of ion-molecular charge transfer in the kinetics of microwave field effect on recombination fluorescence // Chem. Phys. Letters. 2000. Vol. 325. P. 106–114.

13. Анищик С. В., Григорянц В. М., Шеболаев И. В. и др. Импульсный рентгеновский флуориметр с наносекундным разрешением // ПТЭ. 1989. № 4. С. 74–76.

14. Анисимов О. А., Анищик С. В., Боровков В. И. и др. Сверхвысокочастотная система для импульсного рентгеновского флуориметра // ПТЭ. 1999. № 2. С. 92–94.

15. Mashnin A. S., Anishchik S. V., Borovkov V. I. et al. Paramagnetic relaxation of radical cations in alkane solutions as measured by time-resolved magnetic field effects // Applied Magnetic Resonance. 2001. Vol. 20. P. 473–482.

16. Koptug A. V., Saik V. O., Anisimov O. A. et al. Spin-locking in concentration-narrowed OD ESR spectra // Chem. Phys. 1989. Vol. 138. P. 173–178.

Материал поступил в редколлегию 15.10.2007

Д. Ю. Орлова^{1,2}, М. А. Юркин¹, К. А. Семьянов¹, В. П. Мальцев^{1,2}

¹ Институт химической кинетики и горения СО РАН
ул. Институтская, 3, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: orlova@cyto.kinetics.nsc.ru

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛЯРНЫХ КЛЕТОК КРОВИ: НЕЙТРОФИЛЫ *

В работе представлены методика и результаты исследований оптических свойств нейтрофилов периферической крови. Исследования проводились на сканирующем проточном цитометре с одновременным измерением сигналов специфической флуоресценции, вызванной мечеными моноклональными антителами, и светорассеяния от одиночных нейтрофилов. Специфическая флуоресценция служила для идентификации нейтрофилов, а светорассеяние использовалось для определения размера и дифференциального сечения рассеяния клеток. Результаты сопоставлены с данными, рассчитанными с помощью метода дискретных диполей.

Ключевые слова: нейтрофил, дифференциальное сечение рассеяния, метод дискретных диполей.

Введение

В настоящее время аллергические заболевания являются широко распространенными и имеют тенденцию к дальнейшему росту. При этом в структуре аллергической заболеваемости у детей ведущая роль принадлежит аллергическим заболеваниям кожи. В реализации иммунных реакций в коже важная роль принадлежит нейтрофилам. Нейтрофил занимает одну из наиболее активных позиций в системе гуморально-клеточной кооперации крови и соединительной ткани. Это делает его универсальной мишенью и соответственно индикатором различных нарушений гомеостаза. В свою очередь, стимулированный нейтрофил становится мощным эффектором и одним из пусковых механизмов каскадных реакций, обеспечивающих развитие воспаления.

Нейтрофилы осуществляют первую линию защиты от аллергенов различной природы благодаря их основной функции – фагоцитарной. Кроме того, нейтрофилы обладают мощным дезактивационным действием в от-

ношении гистамина – главного медиатора аллергической реакции немедленного типа. Наряду с этим нейтрофилы участвуют в регуляции активности базофилов и тучных клеток, секретируя в очаг воспаления вещества, вовлекающие данные клетки (мишени аллергического процесса) в воспалительную реакцию. В то же время нейтрофилы относятся к клеткам-эффекторам поздней фазы аллергического воспаления, и от их функциональной активности во многом зависит течение и исход аллергического воспаления. Следовательно, функциональный потенциал нейтрофилов и пути его реализации имеют большое значение в развитии аллергических заболеваний.

На данный момент качественно изучены морфология, метаболизм и основные функции нейтрофилов, охарактеризованы десятки различных продуктов их секреции. Повреждение функций нейтрофилов приводит к различным заболеваниям. Эти дефекты могут быть врожденными или приобретенными в результате повреждающего действия на нейтрофилы различных факторов: бактерий,

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 07-04-00356) и Сибирского отделения РАН (интеграционные проекты 2006-3, 2006-14).

вирусов, грибов, лекарственных препаратов и т. д. Клиническими проявлениями большинства дефектов нейтрофилов являются инфекционные поражения кожных и слизистых покровов. В течение последнего десятилетия разработано принципиально новое поколение препаратов, корректирующих недостаточность функций нейтрофилов.

Многие заболевания имеют гематологические проявления, например, некоторые характеристики клеток крови, в частности нейтрофилов, выходят за пределы физиологических норм. Поэтому анализ крови является главным компонентом любых диагностических исследований. В настоящее время широко распространены оптические методы изучения и характеристики клеток крови, такие как светорассеяние и флуоресценция [1]. Для анализа крови оптические методы нашли свое главное применение в проточных цитометрах, позволяющих одновременно измерять сигналы светорассеяния и флуоресценции от одиночных клеток со скоростью до сотен тысяч клеток в минуту, что обеспечивает быстрый и качественный анализ.

Цель настоящего исследования – отработать методику выделения нейтрофилов из периферической крови; провести на сканирующем проточном цитометре идентификацию нейтрофилов с использованием моноклональных антител с флуоресцентной меткой; определить размер и дифференциальное сечение рассеяния нейтрофилов; рассчитать дифференциальное сечение рассеяния на основе теоретического моделирования светорассеяния нейтрофила; сравнить теоретические и экспериментальные дифференциальные сечения рассеяния.

Экспериментальная часть

Для подготовки проб нейтрофилов использовалась цельная периферическая кровь пациентов, которую забирали в 3 мл пробирку с антикоагулянтом. Протокол подготовки пробы:

- 1) забрать пипеткой 1,5 мл крови и перелить в отдельную пробирку;
- 2) довести лизирующим раствором до объема 15 мл;
- 3) выждать 2 мин;
- 4) центрифугировать при 1 500 оборотов в минуту в течение 5 мин при комнатной температуре;

5) аккуратно вылить жидкость из пробирки – клетки останутся на дне;

6) разболтать клетки, проведя несколько раз дном пробирки по ребристой поверхности;

7) дополнить до 15 мл раствором Эрла (без фенолового красного);

8) повторить пункты 4, 5;

9) добавить 20 мкл антител к CD16b (нейтрофилы экспрессируют CD16b [2]);

10) инкубировать в течение 20 мин при комнатной температуре;

11) повторить пункты 6, 7, 8;

12) Добавить 1 мл раствора Эрла для получения рабочей концентрации $\sim 10^6$ клеток/мл;

13) проба готова для измерения, которое необходимо провести в течение 5 часов.

Полученную пробу измеряли на сканирующем проточном цитометре, выходными данными которого являются интенсивность флуоресценции и индикатриса светорассеяния одиночного нейтрофила в диапазоне углов рассеяния от 5 до 60°.

Результаты и обсуждение

Сканирующий проточный цитометр позволяет измерять абсолютные характеристики светорассеяния одиночных частиц любой формы и структуры. Для этого необходимо измерить в одной пробе неизвестные частицы и полимерные микросферы. Индикатрисы светорассеяния микросфер, измеренные на сканирующем проточном цитометре, хорошо согласуются с индикатрисами, посчитанными с помощью теории Ми [3]. Данное свойство используется для установления абсолютного сечения рассеяния для микросфер и анализируемых частиц.

Дифференциальное сечение рассеяния вычислялось по формуле:

$$\sigma = \frac{I_s}{\left(\frac{2\pi n_0}{\lambda}\right)^2},$$

где $I_s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S_{11}(\theta, \varphi) d\varphi$ – сигнал со сканирующего проточного цитометра; S_{11} – элемент матрицы Мюллера; σ – дифференциальное сечение рассеяния; $n_0 = 1,337$ – показатель преломления среды; $\lambda = 660$ нм – длина волны излучения лазера.

Дифференциальное сечение рассеяния характеризует эффективность рассеяния света частицей, разрешенную по углу. Для его определения для нейтрофилов на сканирующем проточном цитометре одновременно измерялись индикатрисы полистирольных микросфер размером 5 мкм и лейкоцитов четырех различных пациентов. Пробоподготовка осуществлялась по описанной выше методике. По специфической флуоресценции были выделены индикатрисы нейтрофилов. Результаты измерения пробы одного пациента представлены на рис. 1. Шкала абсолютного дифференциального сечения рассеяния была определена методом нелинейной регрессии при анализе экспериментальных и теоретических индикатрис полистирольных частиц, рассчитанных с помощью теории Ми. Различия в дифференциальных сечениях рассеяния для разных нейтрофилов вызваны вариацией в размерах клеток и ядер и их внутренней структуре. На различия индикатрис также влияют разброс показателей преломления клетки и ее компонентов.

По измеренным индикатрисам спектральным методом были вычислены размеры клеток четырех пациентов [4]. В табл. 1 представлены средние значения размеров нейтрофилов со стандартной ошибкой среднего и шириной распределения (2 стандартных отклонения).

На рис. 2 представлены зависимости интенсивности светорассеяния нейтрофилов от угла, усредненные по 100 клеткам каждого из четырех пациентов. Усредненные индикатрисы нейтрофилов существенно различаются, тем самым они могут служить индикатором состояния пациента. Для того чтобы ответить на вопрос, какие отличия в клетках вызывают эти изменения в индикатрисах, необходимо решить обратную задачу светорассеяния, что начинается с создания адекватной оптической модели нейтрофила.

Нейтрофилы имеют неоднородную структуру и сложную форму. В качестве первого приближения была предложена оптическая модель нейтрофила в виде сферы, заполненной сферами меньшего диаметра – гранулами, и ядром в виде четырех сфероидов различных размеров (рис. 3). Модель имеет следующий набор параметров, значения которых соответствуют литературным данным по морфологии: диаметр клетки $d_c = 9,6$ мкм; диаметр гранул $d_g = 0,1; 0,15$ и $0,2$ мкм; по-

казатель преломления цитоплазмы клетки $m_c = 1,357$; показатель преломления гранул $m_g = 1,54$; показатель преломления среды (в данной работе это физиологический раствор) $m_0 = 1,337$; объемная доля гранул $f = 0,1$; объемная доля ядра – 0,11. Данная модель была использована для расчета дифференциального сечения рассеяния методом дискретных диполей (МДД) [5], который является универсальным методом расчета светорассеяния от биологических частиц произвольной формы и структуры.

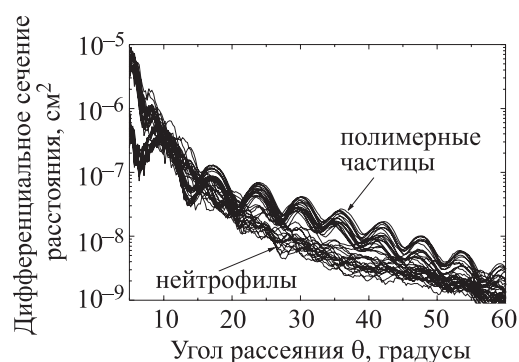


Рис. 1. Дифференциальное сечение нейтрофилов и полистирольных частиц 5 мкм

Таблица 1

Пациент	Среднее значение, мкм	Ширина распределения, мкм
1	$9,63 \pm 0,04$	2,3
2	$10,16 \pm 0,12$	2,6
3	$9,50 \pm 0,06$	4,3
4	$10,34 \pm 0,16$	4,6

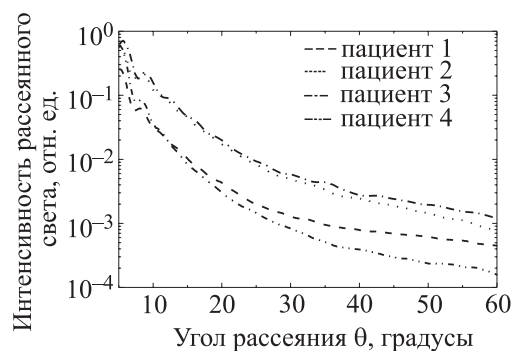


Рис. 2. Интенсивности рассеянного света для нейтрофилов четырех различных пациентов

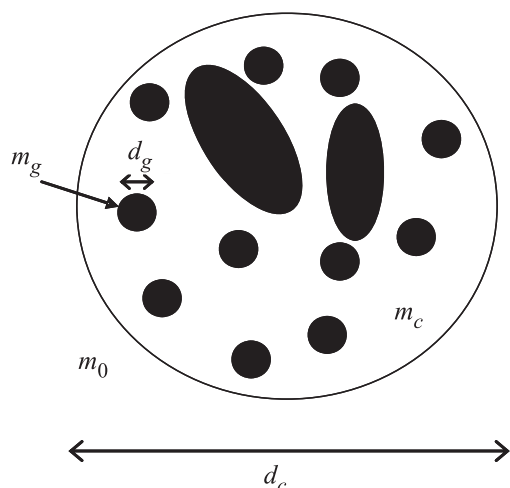


Рис. 3. Оптическая модель нейтрофила. Все гранулы идентичны и расположены случайным образом. Доли ядра отличаются друг от друга по размеру и расположены случайным образом

Таблица 2

Номер индикатрисы	Диаметр гранул d_g , мкм	Угол поворота β , градусы
11	0,10	0
12	0,15	0
13	0,20	0
14	0,15	45
15	0,10	45
16	0,20	45

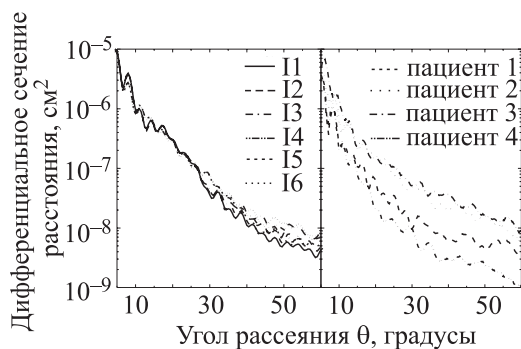


Рис. 4. Дифференциальное сечение рассеяния оптической модели нейтрофилов для различных наборов параметров (слева). Дифференциальное сечение рассеяния для полистирольной частицы 5 мкм и характерных нейтрофилов четырех различных пациентов (справа)

Расчет с помощью МДД производился для шести различных наборов параметров, представленных в табл. 2. Варьировали диаметр гранул d_g и угол β поворота клетки относительно направления распространения падающего излучения. Результаты расчета представлены на рис. 4. Анализ теоретических индикатрис нейтрофилов для различных наборов параметров позволяет сделать заключение, что интенсивность рассеянного света в углы более 30° , зависит от размера гранул и их количества. Абсолютные сечения рассеяния модели нейтрофила (см. рис. 4, слева) и экспериментально измеренных клеток (см. рис. 4, справа) демонстрируют хорошее согласие, что позволяет сделать вывод об адекватности, предложенной нами оптической модели нейтрофила.

Заключение

Данная работа является одной из первых в исследовании оптических свойств нейтрофилов, которые представляют собой, по-видимому, самую сложную биологическую частицу. Впервые эффективность рассеивать свет нейтрофилами исследовалась двумя наиболее современными методами анализа одиночных частиц, а именно с помощью сканирующей проточной цитометрии и метода дискретных диполей.

Впервые было измерено сечение рассеяния нейтрофила, что позволило приступить к созданию оптической модели клетки. Предложена оптическая модель нейтрофила, использованная для расчета абсолютного дифференциального сечения рассеяния методом дискретных диполей. Экспериментальные и теоретические сечения рассеяния хорошо согласуются, что говорит об адекватности предложенной оптической модели.

Следует отметить потенциал сканирующей проточной цитометрии в диагностике связанных с нейтрофилами патологий. Усредненные индикатрисы четырех пациентов продемонстрировали заметные отличия, что может говорить о наличии тех или иных отклонений. В данном направлении планируется исследование в кооперации с клинической лабораторией медицинского учреждения. Использование сканирующей проточной цитометрии открывает новый способ определения гематологических характеристик, которые могут быть использованы как признаки патологий нейтрофилов.

Список литературы

1. Maltsev V. P., Semyanov K. A. Characterisation of bio-particles from light scattering. Inverse and Ill-posed problems series. Utrecht: VSP, 2004.
2. Thureau A.M., Schylz U., Wolf V. et al. Identification of eosinophils by flow cytometry // Cytometry. 1996. P. 150–158.
3. Soini J. T., Chernyshev A. V., Hänninen P. E. et al. A new design of the flow cuvette

and optical set-up for the Scanning Flow Cytometer // Cytometry. 1998. Vol. 31. P. 78–84.

4. Tarasov P., Yurkin. M., Avrorov P. et al. Optics of erythrocytes // Optics of Biological Particles. 2007. P. 231–246.

5. Yurkin M. A., Hoekstra A. G. The discrete dipole approximation: an overview and recent developments // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2007. Vol. 106. P. 558–589.

Материал поступил в редколлегию 05.10.2007

ВОЗМОЖНОСТЬ СИЛЬНОГО РАЗОГРЕВА ФОТОХИМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПОД ВЛИЯНИЕМ СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ*

Рассмотрена открытая фотохимическая система, которая поддерживается в неравновесном стационарном состоянии за счет лазерного излучения. В результате фотолиза образуются радикалы, которые затем могут рекомбинировать. Показано, что в этой реакционной системе при определенных условиях могут возникать три стационарных состояния с разными температурами, из которых два являются устойчивыми, третье – неустойчивым. Меняя вероятность геминальной рекомбинации и скорость объемного процесса, путем изменения внешнего магнитного поля можно нарушить устойчивость стационарного состояния и перевести систему в другое стационарное состояние, осуществив тем самым сильный разогрев системы.

Ключевые слова: фотохимическая система, радикалы, рекомбинация, магнитные эффекты, стационарные состояния, фазовый переход, гистерезис.

Введение

Влияние магнитных полей на химические процессы давно привлекает внимание исследователей. Первые попытки относятся еще к концу XIX в. Большинство этих попыток чаще всего давало отрицательные результаты, а сообщение о наблюдении эффекта обычно не подтверждалось последующими экспериментами. Долгие годы единственным надежно установленным и воспроизводимым экспериментальным результатом была магнитная преддиссоциация молекул йода в газовой фазе [1].

В 1970-е гг. ситуация коренным образом изменилась. В это время сформировались физически ясные представления о том, как сравнительно слабые постоянные и переменные магнитные поля порядка нескольких эрстед или нескольких десятков эрстед при определенных условиях могут заметным (регистрируемым) образом влиять на скорости химических реакций в конденсированной фазе. Речь идет о таких важных и широко распространенных процессах, как реакции с участием парамагнитных партнеров. Это реакции рекомбинации радикалов, реакции радикалов с триплетными молекулами и с парамагнитными комплексами, реакции между триплетными молекулами и т. д.

Приведем ряд экспериментальных результатов по влиянию магнитных полей на химические реакции. В работе [2] обнаружено

влияние магнитного поля в реакции пентафторбензилхлорида с бутиллитием в гексане. Показано, что соотношение между выходами продуктов рекомбинации меняется на 30–40 %. В работе [3] зафиксировано влияние поля на выход радикалов в реакции переноса электрона на триплетно-возбужденную молекулу красителя от доноров – галогенопроизводных анилина. В статье [4] установлено влияние магнитного поля на реакцию эмульсионной полимеризации полистирола, индуцированной фотораспадом дибензилкетона. Магнитное поле изменяло здесь средний молекулярный вес полистирола. Ряд интересных результатов был получен в реакциях отрыва атомов водорода электронно-возбужденными триплетными молекулами. Было показано, что магнитный эффект существенно повышается (до 30 %) при проведении реакций в мицеллярных растворах [5]. Есть много экспериментальных результатов по влиянию переменных магнитных полей на радикальные реакции [6]. Влияние переменных полей носит резонансный характер, поэтому возможно заметное влияние, даже если эти поля очень слабые. Однако многочисленные исследования показывают, что обычно влияние магнитного поля на химические реакции мало, составляет несколько процентов, и довольно редко – несколько десятков процентов.

Было установлено, что механизм влияния магнитного поля не связан с изменени-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-03-32651) и Рособразования (инновационный образовательный проект № 456 от 05 июня 2007 г.).

ем энергетики процесса или с ориентирующим влиянием поля на электронные спины парамагнитных частиц в силу малости энергии тех взаимодействий, которые ответственны за обсуждаемые магнитные эффекты. Например, энергия сверхтонкого взаимодействия в CH_3 радикале на 5 порядков меньше, чем тепловая энергия при комнатной температуре.

Магнитный эффект проявляет себя в конкуренции различных каналов превращения в элементарных стадиях реакции и обусловлен зависимостью эффективности химического процесса от спинового состояния пары реагирующих частиц, а также магниточувствительностью переходов между спиновыми состояниями – модель радикальных пар [6–9]. Поэтому в большинстве случаев говорят о кинетическом магнитном эффекте в реакциях.

Вопрос о влиянии слабых магнитных полей на биохимические реакции и на живые системы также имеет давнюю историю. Значительный материал надежно показывает, что магнитные эффекты в биохимических процессах вполне реальны и иногда очень значительны. В неравновесной термодинамике хорошо известно, что даже малые возмущения могут вызвать большие последствия в нелинейных системах, где важную роль играют обратные связи. Причиной этого является нарушение устойчивости состояний и изменение режима процесса. Обычно химические реакции описываются нелинейными кинетическими уравнениями, поэтому при определенных условиях малые возмущения могут вызвать большие эффекты. В биологических системах встречается несколько типов явлений, свидетельствующих о нелинейности протекающих в них процессов. Можно думать, что в таких системах сильное влияние слабых магнитных полей тоже может быть обусловлено нарушением устойчивости стационарных состояний и переходом системы или ее части в другой режим поведения.

Известно несколько фотохимических систем, в которых экспериментально удавалось наблюдать несколько стационарных состояний и неравновесные переходы между ними. Так, в работе [10] изучалась реакция димеризации радикалов фторсульфата под действием лазерного излучения в газовой фазе. Благодаря излучению система поддерживалась в неравновесном состоянии. Существенным свойством рассматри-

ваемого процесса является поглощение света только мономером. Процесс сопровождается разогревом системы. Было экспериментально показано, что при температуре выше 373 К существует только одно стационарное состояние, а при более низких температурах устойчивы два состояния системы – одно с высокой, а другое с низкой поглощательной способностью.

Бистабильность такого же типа экспериментально наблюдалась в освещенном водном растворе *o*-крезолфталейна (ОСР) [11]. Эта слабая кислота диссоциирует в водном растворе в соответствии с уравнением. Благодаря лазерному излучению, которое поглощается только основанием, происходит разогрев системы. При температурах меньших 300 К (при $pH \approx 9$) наблюдалось два стационарных состояния с разными поглощательными способностями.

В работе [12] на примере классической тримолекулярной модели (брюсселятора) проанализирована возможность нарушения устойчивости стационарного состояния и появления предельного цикла под действием внешнего магнитного поля.

Постановка задачи

Для объяснения сильного влияния магнитных полей в биологических системах недостаточно использовать только модель радикальных пар, которая в обычных условиях предсказывает довольно малые эффекты, в лучшем случае около десяти процентов. Можно думать, что в биологических системах сильное влияние слабых магнитных полей может быть обусловлено нарушением устойчивости стационарных состояний и переходом системы в другой режим поведения. Необходимым условием такого влияния является наличие магниточувствительной стадии в рассматриваемой модели, например реакции рекомбинации радикалов. Следовательно, поиск сравнительно простых, но достаточно реалистических систем, в которых сильное влияние магнитного поля возможно, представляет значительный интерес. При этом в поле зрения в первую очередь попадают открытые химические системы, находящиеся вдали от равновесия.

В данной работе рассмотрены особенности проявления магнитных взаимодействий в реакциях с участием радикальных пар в условиях нарушения устойчивости для про-

стейшей фотохимической системы. Эта система описывает обратимую реакцию диссоциации под действием внешнего излучения (лазера) с образованием двух радикалов. Механизм этой реакции состоит из двух стадий: рождение геминальной пары радикалов и их последующая рекомбинация в объемном процессе.

Предполагается, что внешние магнитные поля, изменяя константы скоростей процессов с участием радикалов, в состоянии при определенных условиях нарушают устойчивость стационарных состояний и переводить систему из одного стационарного состояния в другое, заметно отличающееся по свойствам от первоначального.

Фотохимическая система

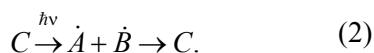
Рассматривается обратимая реакция диссоциации в конденсированной фазе



Реагирующая система поддерживается в неравновесном стационарном состоянии за счет внешнего излучения (лазера), под действием которого происходит распад исходной молекулы с образованием радикалов. Рассматриваемая система является открытой, так как может обмениваться энергией с резервуаром.

Сначала рассмотрим ситуацию, когда внешнее магнитное поле отсутствует, и покажем, что в рамках этой модели существуют три стационарных состояния. Здесь радикалы можно рассматривать как обычные реагенты без учета их внутренних спиновых состояний.

Механизм этой реакции можно представить в виде последовательности двух процессов. Первый включает в себя элементарные реакции, протекающие в геминальной клетке. Из молекулы предшественницы (C) под действием лазера рождается радикальная пара ($\dot{A} + \dot{B}$). Прежде чем разойтись и выйти в объем, радикалы могут рекомбинировать в исходную молекулу с некоторой вероятностью w , которая зависит от характера относительного движения радикалов и их реакционной способности



Второй процесс описывает объемную рекомбинацию радикалов



и, согласно кинетическому закону действия масс, скорость процесса (3) равна

$$\frac{dn_A}{dt} = \frac{dn_B}{dt} = -\frac{dn_C}{dt} = -Kn_A n_B, \quad (4)$$

где n_A, n_B, n_C – концентрации частиц A, B и C соответственно; K – константа скорости реакции. Везде далее ввиду очевидного равенства концентраций реагентов A и B ($n_A = n_B$) будем рассматривать только радикалы сорта A .

Энергию, поглощенную средой, будем описывать с помощью закона Бугера – Ламберта – Бера, предполагая, что на данной частоте генерации лазера поглощают только молекулы C . Интенсивность пучка I_{out} после прохождения лазерного излучения через вещество описывается формулой

$$I_{out} = I_0 \exp(-\varepsilon n_C l),$$

где I_0 – мощность падающего излучения; ε – коэффициент экстинкции вещества C ; l – длина кюветы. Тогда энергия I_{abs} , поглощаемая реагирующей системой в единицу времени равна

$$I_{abs} = I_0 - I_{out} = I_0(1 - \exp(-\varepsilon n_C l)). \quad (5)$$

Отметим, что при прохождении лазерного пучка через вещество излучение поглощается, и интенсивность пучка падает. Следовательно, система, вообще говоря, неоднородна, и необходимо принимать во внимание пространственную зависимость внутренней энергии и концентраций. Однако для упрощения мы будем предполагать, что интенсивность теплообмена и массообмена внутри реагирующей системы достаточно высока и неоднородность не существенна.

Мощность внешнего излучения эффективно влияет на эволюцию реагирующей системы. Средняя скорость образования радикалов N_{gem} сорта A в геминальной клетке равна

$$\frac{dN_{gem}}{dt} = \frac{I_{abs}}{h\nu}, \quad (6)$$

где ν – частота генерации лазера; h – постоянная Планка. Тогда скорость образования в объеме реагентов N_{bulk} сорта A в реакции (2), согласно соотношению (6), равна

$$\frac{dN_{bulk}}{dt} = \frac{dN_{gem}}{dt} (1 - w) = \frac{I_{abs}}{h\nu} (1 - w). \quad (7)$$

Принимая во внимание равенства (4) и (7), запишем скорость изменения средней концентрации радикалов A в реакции (1) с учетом геминального (2) и объемного (3) процессов:

$$\frac{dN_A}{dt} = \frac{I_{abc}}{V\hbar\nu} (1-w) - Kn_A^2, \quad (8)$$

где V – объем кюветы, в которой находится исследуемая жидкость.

Внутренняя энергия системы меняется за счет поглощения излучения и отдачи тепла резервуару, который находится при постоянной температуре T_0 . Среднюю скорость изменения внутренней энергии системы можно записать в виде

$$\frac{dE}{dt} = I_{abs} - \alpha(T - T_0), \quad (9)$$

где α – коэффициент теплоотдачи между реагирующей системой и резервуаром; T – средняя температура системы.

Константа скорости, входящая в уравнение (8), есть функция от температуры $K(T)$. Классическое выражение для ее описания, не учитывающее спиновое состояние реагентов, обычно записывают в виде [13]

$$K = \frac{\nu}{\tau_R} w \equiv \frac{\nu}{\tau_R} \frac{U\tau_R}{1 + U\tau_R},$$

где ν – объем реакционной зоны; τ_R – время нахождения реагентов в реакционной зоне; w – эффективность встречи; U – квазимономолекулярная скорость реакции, которую чаще всего записывают в виде закона Аррениуса

$$U(T) = U_0 \exp\left(\frac{A}{k} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right),$$

где U_0 – константа скорости при температуре T_0 (предэкспонент); A – энергия активации процесса (3); k – постоянная Больцмана.

Для того чтобы найти зависимость концентрации n_A от времени, необходимо решить дифференциальное уравнение (8). Однако интересующие нас стационарные состояния определяются условиями

$$\frac{dn_A}{dt} = 0; \quad \frac{dE}{dt} = 0, \quad (10)$$

и дифференциальные уравнения сводятся к алгебраическим.

На основе уравнений (8), (9), равенства (5) и условия (10), запишем систему уравнений, определяющую возникновение стационарных состояний в рассматриваемой реагирующей системе:

$$\begin{cases} \frac{I_0(1 - \exp(-\varepsilon n_C l))}{V\hbar\nu} (1-w) - Kn_A^2 = 0 \\ I_0(1 - \exp(-\varepsilon n_C l)) - \alpha(T - T_0) = 0, \\ n_{C_0} = 2n_A + n_C \end{cases} \quad (11)$$

где n_{C_0} – начальная концентрация вещества C . При этом предполагаем, что начальные концентрации радикалов A и B равны нулю. Третье уравнение системы описывает закон сохранения общего числа частиц.

Так как и температура, и концентрация непосредственно доступны измерению, опишем стационарные состояния в этих переменных. Найти аналитическую зависимость концентрации n_A радикалов сорта A от величины внешнего излучения I_0 не представляется возможным. Однако нетрудно видеть, эти величины могут быть непосредственно найдены из системы (11) как функции от температуры

$$n_A(T) = \sqrt{\frac{\alpha(T - T_0)(1-w)}{K(T)V\hbar\nu}} \quad (12)$$

и

$$I_0(T) = \frac{\alpha(T - T_0)}{1 - \exp\left(\varepsilon l \left(2\sqrt{\frac{\alpha(T - T_0)(1-w)}{K(T)V\hbar\nu}} - n_{C_0}\right)\right)}. \quad (13)$$

Зная соотношения (12) и (13), можно построить параметрическую зависимость концентрации n_A от величины внешнего излучения I_0 .

Подбирая параметры, входящие в конечные выражения (12) и (13), можно добиться ситуации, при которой возможно наблюдение трех вырожденных стационарных состояний. В случае реалистического набора параметров

$$\begin{aligned} T_0 &= 200 \text{ К}, & \alpha &= 5 \cdot 10^{-3} \frac{\text{Дж}}{\text{с} \cdot \text{К}}, \\ \frac{\nu}{\tau_R} &= 1 \cdot 10^{-13} \frac{\text{см}^3}{\text{с}}, & U_0 \cdot \tau_R &= 0,02, \\ A &= 10 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}, & \nu &= 6 \cdot 10^{14} \frac{1}{\text{с}}, \\ V &= 1 \text{ см}^3, & l &= 1 \text{ см}, & \varepsilon &= 1 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2, \\ n_{C_0} &= 2 \cdot 10^{16} \frac{1}{\text{см}^3} \end{aligned} \quad (14)$$

соответствующие зависимости выглядят следующим образом (рис. 1, 2, 3).

Теперь рассмотрим вопрос о возможности нарушения условий устойчивости стационарных состояний под влиянием внешних магнитных полей для обратимой реакции диссоциации (1). Необходимым условием такого влияния является наличие магниточувствительной стадии в рассматриваемой модели. В рамках этой модели

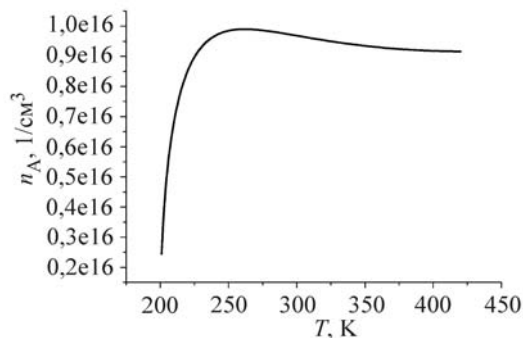


Рис. 1. Зависимость концентрации радикалов сорта A от температуры реагирующей системы

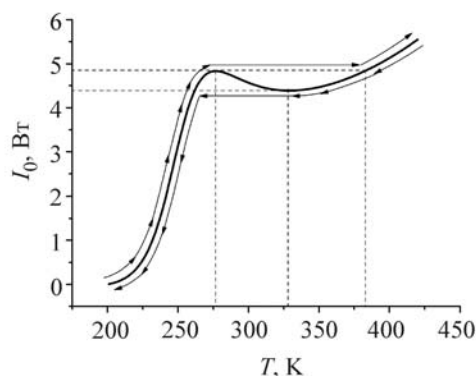


Рис. 2. Зависимость температуры реагирующей системы от интенсивности внешнего излучения (для наглядности по оси абсцисс отложена мощность внешнего излучения, по оси ординат – температура)

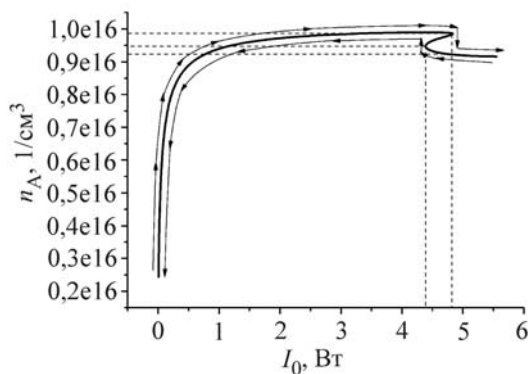


Рис. 3. Зависимость концентрации радикалов сорта A от мощности внешнего излучения

магнитные эффекты обусловлены зависимостью эффективности химического процесса от спинового состояния пары реагирующих частиц и магниточувствительностью переходов между спиновыми состояниями.

Пусть в результате распада молекул C образуется раствор, содержащий радикалы A и B , которые теперь имеют электронный спин, равный $1/2$. Тогда суммарный спин радикалов A и B может равняться нулю или единице, соответственно радикальная пара может находиться в синглетном или триплетном состоянии.

Магнитное взаимодействие способно вызывать синглет-триплетные переходы в радикальной паре. Наиболее важными являются изотропная часть зеемановского взаимодействия и электронных спинов радикалов с внешними магнитными полями и изотропные сверхтонкие взаимодействия электронов с магнитными ядрами (предполагается, что быстрое вращение радикалов усредняет до нуля анизотропные взаимодействия). Спин-гамильтониан этих взаимодействий имеет вид

$$\hat{H} / \hbar = \omega_A \hat{S}_{Az} + \omega_B \hat{S}_{Bz} + \sum_i a_i \hat{S}_A \hat{I}_{Ai} + \sum_j a_j \hat{S}_B \hat{I}_{Bj},$$

где $\omega_{A,B} = g_{A,B} \beta B_0 / \hbar$ – ларморовские частоты, а $g_{A,B}$ – g -факторы радикалов пары; B_0 – индукция внешнего магнитного поля; a_i – константа сверхтонкого взаимодействия.

Хорошо известно, что эффективность синглет-триплетных переходов зависит от индукции внешнего магнитного поля не монотонно [6].

После фотовозбуждения молекула попадает, как правило, в триплетное возбужденное состояние и из него распадается, в результате чего радикальная пара в процессе диссоциации (2) образуется первоначально в триплетном состоянии. Рекомбинирует радикальная пара обычно в синглетном состоянии, так как основное состояние подавляющего большинства молекул является синглетным.

Наличие стационарных состояний в рамках этой модели будут описываться системой уравнений (11), только в ней вероятность геминальной рекомбинации w и константа скорости $K(T)$ теперь будут зависеть от величины внешнего магнитного поля.

Вероятности геминальных процессов с учетом синглет-триплетных переходов определяются соотношениями [14]

$$w^S = \frac{U\tau_S}{1+U\tau_S};$$

$$w^T = \frac{U(\tau_R - \tau_S)/3}{1+U\tau_S},$$

где w^S – вероятность рекомбинации при условии образования пары в синглетном состоянии; w^T – вероятность рекомбинации при условии образования в триплетном состоянии; τ_S – среднее время нахождения реагентов в синглетном состоянии в реакционной зоне при условии, что вначале радикалы находились в реакционной зоне в синглетном состоянии.

При случайной встрече двух радикалов в растворе их электронные спины не коррелированы. К моменту встречи суммарный спин двух неспаренных электронов может быть 0 или 1. Очевидно, что статистический вес встреч радикалов в синглетном состоянии будет равен $1/4$, а в триплетном – $3/4$. Исходя из этого константу скорости объемного процесса с учетом синглет-триплетных переходов можно представить в виде

$$K = \frac{v}{\tau_S} \left(\frac{w^S}{4} + \frac{3w^T}{4} \right) = \frac{v}{4\tau_R} \frac{U_0\tau_R}{1+U_0\tau_S}.$$

Время τ_S , например, для диффузионного движения сферических радикалов с изотропной реакционной способностью в магнитных полях, существенно превышающих локальные поля магнитных ядер, определяется по формуле [6]

$$\tau_S = \frac{\tau_R}{2} \left(1 + \frac{1}{1 + \sqrt{|\Delta\omega|\tau_D/2}} \right).$$

Внешнее магнитное поле изменяет среднее время τ_S нахождения пары в реакционной зоне в реакционноспособном синглетном состоянии, тем самым изменяя вероятность геминальной рекомбинации и константу скорости.

Для типичных экспериментальных условий рекомбинации радикалов в невязких растворах время τ_S отличается от времени τ_R примерно на 10 %. Для дальнейшей оценки примем, что

$$\tau_S = 0,9\tau_R.$$

Это и является характерным масштабом влияния магнитного поля порядка нескольких эрстед на радикальные реакции. Отметим, однако, что если время жизни пары в клетке достаточно велико (например, достаточно вязкие системы или склонность радикалов к образованию ассоциатов), то даже очень слабое поле может повлиять на константу скорости рекомбинации радикалов. В любом случае независимо от характера движения и устройства зоны реакции можно сказать, что время τ_S ограничено следующими пределами:

$$\frac{\tau_R}{2} < \tau_S < \tau_R.$$

При параметрах (14) фотохимической системы решения (12) и (13) с учетом влияния внешнего магнитного поля дают следующие зависимости (рис. 4, 5). Как и раньше, для наглядности по оси абсцисс отложена мощность внешнего излучения, по оси ординат – температура (см. рис. 2, 4). Везде далее сплошной линией будут обозначаться зависимости при включенном внешнем магнитном поле ($\tau_S = 0,9\tau_R$), точками – без магнитного поля ($\tau_S = \tau_R$).

Обсуждение полученных результатов

Управляющим параметром в рассматриваемой системе является мощность внешнего излучения I_0 . На рис. 2 представлена зависимость температуры реагирующей системы от величины внешнего излучения. Видно, что при определенных значениях управляющего параметра существуют критические точки: 4,4 и 4,8 Вт. Эти точки являются точками бифуркации, так как при увеличении (или уменьшении) мощности лазера происходит скачкообразное изменение числа стационарных состояний – в зависимости от интенсивности I_0 излучения лазера могут существовать стационарные состояния с одной или тремя различными значениями температуры реагирующей системы.

При значениях параметра чуть выше (или чуть ниже) критического стационарное состояние устойчиво. В области вырождения стационарных состояний асимптотически неустойчивы только те стационарные состояния, которые лежат между максимумом и минимумом кривой на рис. 2, т. е. для которых выполняется неравенство $(\partial I_0 / \partial T) < 0$. Однако критическая точка не обязательно должна быть точкой бифуркации.

На рис. 2 существует единственная точка, для которой $(\partial I_0 / \partial T) = (\partial^2 I_0 / \partial T^2) = 0$, для всех остальных точек $(\partial I_0 / \partial T) > 0$. Следовательно, только критическое состояние не обладает асимптотической устойчивостью (тем не менее это критическое состояние устойчиво, так как средняя траектория ограничена и не осциллирует). Эта критическая точка того же типа, что и точки на критической изотерме перехода газ – жидкость, при наличии которых система является бистабильной аналогично фазовым переходам первого рода.

Критические точки бифуркации в бистабильных системах приводят к гистерезису. Как видно из рис. 2, при выключенном лазерном излучении система находится при температуре резервуара $T = T_0 = 200$ К. При увеличении интенсивности до 4,4 Вт система переходит в область бистабильности.

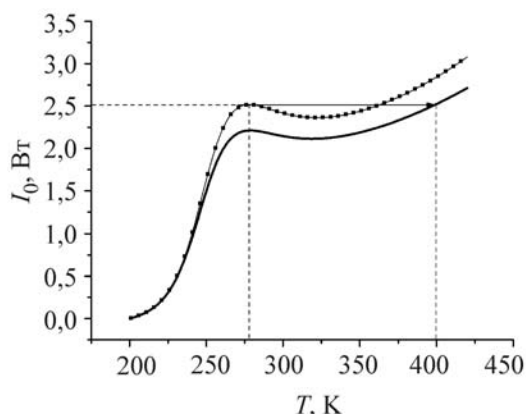


Рис. 4. Зависимость температуры реагирующей системы от величины внешнего излучения при включенном и выключенном магнитном поле

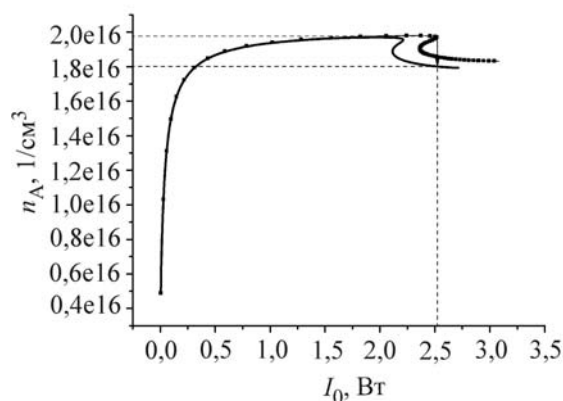


Рис. 5. Зависимость концентрации радикалов сорта A от величины внешнего излучения при включенном и выключенном магнитном поле

При дальнейшем увеличении интенсивности система остается на ветви с низкой температурой до тех пор, пока не будет достигнута точка бифуркации с температурой 278 К. При дальнейшем увеличении интенсивности лазера с 4,8 Вт температура изменяется скачком в направлении, указанном на рис. 2 стрелкой. При плавном уменьшении интенсивности лазерного излучения система не проходит описанный выше путь в обратном направлении, так как она находится теперь на ветви стационарных состояний с высокой температурой. В результате возникает петля, так как система скачком, указанным на рис. 2 нижней стрелкой, переходит на ветвь с низкой температурой при достаточно малой интенсивности.

На рис. 3 представлена зависимость концентрации радикалов сорта A от интенсивности лазерного излучения. Очевидно, что точки 4,4 и 4,8 Вт на этой кривой вновь являются точками бифуркации. При этом для концентрации будет наблюдаться явление гистерезиса, вызванное описанным выше поведением температуры при изменении интенсивности лазерного излучения.

На рис. 4 представлены две зависимости температуры реагирующей системы от величины внешнего излучения, соответствующие стационарным состояниям при включенном и выключенном магнитном поле. Внешнее магнитное поле изменяет константу скорости и вероятность геминальной рекомбинации по механизму радикальных пар. Несмотря на то что эти эффекты достаточно малы, они приводят к тому, что в рассматриваемой модели множество стационарных состояний при отсутствии внешнего магнитного поля не совпадает со множеством стационарных состояний при наличии магнитного поля. Соответственно не будут совпадать области бистабильности и точки бифуркации – в зависимости от величины индукции внешнего магнитного поля при заданной интенсивности I_0 излучения лазера могут существовать стационарные состояния с одной или тремя различными значениями температуры реагирующей системы. При мощности лазера около 2,5 Вт и выключенном магнитном поле реагирующая система будет находиться на ветви с низкой температурой и иметь стационарную температуру около 275 К. Если же мы включим магнитное поле, то это стационарное состояние будет уже неустойчивым, и при заданной мощности излучения система скач-

ком перейдет на ветвь с высокой температурой в другое стационарное состояние с температурой около 400 К. В результате чего произойдет сильный разогрев системы, который будет сопровождаться скачком концентрации (см. рис. 5).

Таким образом, в рассматриваемой фотохимической системе может происходить неравновесный фазовый переход между двумя устойчивыми стационарными состояниями, подобный фазовому переходу первого рода. Сравнительно слабое постоянное магнитное поле порядка нескольких эрстед может являться причиной нарушения условия устойчивости стационарного состояния и кардинальным образом изменить свойства системы.

Следует иметь в виду, что в рассмотренной модели параметры системы постоянны в большом диапазоне температур. Учет зависимости параметров от температуры лишь уточнит полученные результаты и не даст кардинально новых.

Заключение

Рассмотрена открытая фотохимическая реакция с участием парамагнитных частиц на примере обратимой реакции диссоциации под действием внешнего излучения.

Показано, что в этой системе могут наблюдаться вырожденные стационарные состояния, а также явление гистерезиса. При определенных условиях может происходить неравновесный фазовый переход между двумя устойчивыми стационарными состояниями, подобный фазовому переходу первого рода.

Показано, что слабое магнитное поле порядка нескольких эрстед может являться причиной нарушения условий устойчивости стационарных состояний и переводить систему из одного состояния в другое, заметно отличающееся от первоначального. При этом будет наблюдаться сильный разогрев системы и скачкообразное изменение концентрации.

Список литературы

1. Vique J., Broyer M., Zehman J. Predissociation effects in the $B^3\Pi_{O^+U}$ state of iodine // J. Chem. Phys. 1975. Vol. 62. No. 12.
2. Сагдеев Р. З., Салихов К. М., Лешина Т. В. и др. Влияние магнитного поля на

радикальные реакции // Письма в ЖЭТФ. 1972. Вып. 16. С. 599–602.

3. Steiner U. Magnetic field effect on the radical yield of electron transfer reactions between a dye triplet and heavy atom substituted electron donors // Z. Naturforsch. 1979. Vol. A 34. P. 1093–1098.

4. Turro N., Chow V-F., Chung Ch.-J., Tung Ch.-Ho. Magnetic field and magnetic isotope effects on photoinduced emulsion polymerization // J. Amer. Chem. Soc. 1983. No. 105. P. 1572–577.

5. Tanimoto Y., Takase S., Jinda C. et al. Laser Flash Photolysis Studies of Magnetic Field Effects on the Hydrogen Abstraction Reaction of Quinoline in Micellar Solution // Chem. Phys. 1992. No. 162. P. 7–14.

6. Salikhov K. M., Molin Yu. N., Sagdееv R. Z., Buchachenko A. L. Spin polarization and magnetic effects in radical reactions. Amsterdam: Elsevier, 1984.

7. Kaptein R., Oosterhoff J. L. Chemically induced dynamic nuclear polarization. Part 2: Relation with anomalous ESR spectra // Chem. Phys. Lett. 1969. Vol. 4. P. 195–197.

8. Kaptein R., Oosterhoff J. L. Chemically induced dynamic nuclear polarization. Part 3: Anomalous multiplets of radical coupling and disproportionation products // Chem. Phys. Lett. 1969. Vol. 4. P. 214–216.

9. Closs G. L. A mechanism explaining nuclear spin polarization in radical combination reactions // J. Amer. Chem. Soc. 1969. Vol. 91. P. 4552–4554.

10. Zimmermann E. C., Ross J. Light induced bistability in $S_2O_6F_2rSO_3F$: theory and Experiment // J. Chem. Phys. 1984. Vol. 80. P. 720–729.

11. Kramer J., Ross J. Thermochemical bistability in an illuminated liquid-phase reaction // J. Chem. Phys. 1986. Vol. 90. P. 923–926.

12. Purto P. A. External magnetic fields as a possible cause of stability disturbance of stationary states far from equilibrium in reactions involving radical pairs // Appl. Magn. Reson. 2004. Vol. 26. P. 83–97.

13. Докторов А. Б. Основы теории элементарных реакций. Новосибирск, 1993.

14. Purto P. A., Doktorov A. B. The green function method in the theory of nuclear and electron spin polarization. Part 1: General theory, zero approximation and its application // Chem. Phys. 1993. Vol. 178. P. 47–65.

¹ Институт химической кинетики и горения СО РАН
ул. Институтская, 3, Новосибирск, 630090, Россия

² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: lavrik@ns.kinetics.nsc.ru

ИЗУЧЕНИЕ ДЕЙСТВИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ НА ЛИОФИЛИЗОВАННЫЕ ОБРАЗЦЫ БЫЧЬЕГО СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА МЕТОДАМИ ИК И УФ СПЕКТРОСКОПИИ

Изучено влияние облучения светом, генерируемого лазером на свободных электронах ($\lambda = 120\text{--}140$ мкм, мощность 130–280 мВт), на лиофилизированные образцы бычьего сывороточного альбумина (БСА). В ИК спектрах обнаружено уменьшение величины оптической плотности полос характеристических частот ($2\,700\text{--}3\,500$ см⁻¹) на (40 ± 20) %. В УФ спектрах поглощения на $\lambda = 275$ нм установлено уменьшение величины оптической плотности на (40 ± 10) %. Облучение водных растворов БСА не приводило к изменению спектров УФ поглощения. Термический нагрев образцов до 55 °С не приводил к изменениям ИК и УФ спектров поглощения. Объяснение наблюдаемых эффектов при облучении проводится в рамках гипотезы о наличии фотохимической деструкции, лазерного свеллинга и абляции образцов БСА.

Ключевые слова: терагерцовое излучение, бычий сывороточный альбумин, ИК и УФ спектры поглощения, фотохимическая деструкция, лазерный свеллинг, абляция.

Введение

Актуальность исследований влияния взаимодействия электромагнитного излучения терагерцовой частоты (0,5–10 ТГц) с биомолекулами связана с влиянием этого излучения на биологические объекты [1–3]. Свет этого спектрального диапазона поглощается многочисленными биомолекулами и водой [4]. Поглощение в этой спектральной области обусловлено наличием коллективных мод [5]. Число работ, посвященных изучению влияния взаимодействия электромагнитного излучения терагерцовой частоты собственно с биомолекулами, относительно не велико [6–8]. В частности, в работе [6] было изучено влияние 900 мкм радиации на взаимодействие гем–глобин в водном растворе. Наблюдаемые изменения величины взаимодействия после облучения авторы объясняли передачей энергии от квазикристаллической структуры воды, которая поглощает это излучение, на молекулу субстрата. В работе [7]

с помощью техники диффузионной спектроскопии, позволяющей получать информацию о размерах аэрозольных частиц, было показано, что облучение светом лазера на свободных электронах ($\lambda_{\text{изл}} = 100\text{--}200$ мкм, время импульса 50 пс, частота 5,6 МГц, средняя мощность 200 Вт) молекул ДНК фага λ , лизоцима и пероксидазы из хрена приводит к мягкой абляции. Наличие «мягкости», т. е. неполного разрушения исходной молекулы, при абляции с поверхности, на которой находились молекулы, авторы связывали с тем, что биомолекулы, подвергшиеся абляции, сохраняли функциональную активность. В работе [8] сообщается о влиянии излучения импульсного ИК лазера с длиной волны $\lambda = 90$ мкм на вторичную структуру лиофилизованного препарата бычьего сывороточного альбумина (БСА) и активность ряда ферментов. В этой работе использовался лазер с энергией в импульсе 5 мДж, а величина дозы варьировалась от 0,2 до 3 Дж. Было показано, что интенсивность флуоресценции зон-

да, которая пропорциональна степени связывания с молекулой БСА, уменьшалась после облучения немонотонным образом. Изменения интенсивности флуоресценции зонда авторы связывали с деформацией вторичной структуры белка, а из результатов определения активности сделали вывод о сохранении полипептидных цепей и отсутствии олигомеризации протеинов. Таким образом, вся имеющаяся информация о влиянии излучения субмиллиметрового диапазона на биомолекулы была основана на данных, полученных не прямыми методами, а с помощью косвенных измерений, которые не дают непосредственной информации об изменении состояния исходного вещества после воздействия излучением терагерцовой частоты. Способами, которые позволяют получать такую информацию, являются методы ИК и УФ спектроскопии. Сообщения о применении этих методов для наблюдения за состоянием биомолекул, подвергшихся облучению излучением терагерцовой частоты, отсутствуют. Таким образом, представляет интерес, используя эти методы, попытаться получить сведения о структуре образцов биомолекул, перенесших такое воздействие.

Целью настоящей работы было применение методов ИК и УФ спектроскопии для наблюдения эффектов облучения лиофилизированных образцов БСА излучением с длиной волны генерации 120–140 мкм, генерируемого лазером на свободных электронах (ЛСЭ). В качестве количественного спектрального параметра, непосредственно связанного с возможными изменениями структуры облучаемого образца, была выбрана величина интенсивности спектров поглощения характеристических полос ИК и УФ спектров.

Материалы и методы

Источником терагерцового излучения служил лазер на свободных электронах [9]. Параметры излучения были следующие: $\lambda = 120\text{--}140$ мкм, время импульса 50 пс, частота 5,6 МГц, мощность 130–300 мВт. Время облучения составляло от 3 до 9 мин. Диаметр лазерного пучка составлял ~ 2 см. Контроль мощности осуществлялся с помощью измерителя мощности ИМО-2.

Эксперименты по термическому нагреву образцов проводились помещением кюветы в термостат или обдуванием горячего воздуха из тепловой пушки. Образцы нагревались

до 55 °С и выдерживались при этой температуре в течение 15 мин. Температура нагрева образца измерялась дифференциальной термопарой и ртутным термометром.

Лиофилизированный препарат БСА фирмы «Реанал» использовался без дополнительной очистки. Исходный препарат представлял собой отдельные плоские пластинки с размерами до 3 мм в диаметре и толщиной приблизительно 0,01 мм. Облучение образцов БСА при анализе с помощью ИК спектроскопии проводилось в герметичных кюветах с фторопластовыми окнами. Толщина окон составляла 3 мм. При этом величина оптической плотности составляла $\sim 0,3$. Использование таких окон позволяет регистрировать спектры в диапазоне $\nu = 2\,600\text{--}4\,000\text{ см}^{-1}$. Растертый в агатовой ступке облучаемый образец БСА помещался на дно 50 мкм цилиндрического углубления одного из окон. Диаметр углубления был 30 мм. Окна зажимались стальными пластинами. Стабильность положения образцов в такой кювете была достаточно высока, поскольку приготовленный для облучения образец с точностью до 1 % не менял своего спектра поглощения при вибрационном воздействии. Анализ ИК спектров облученных и контрольных образцов проводился в той же кювете, в которой проводилось облучение. При анализе ИК спектров поглощения использовался Фурье-спектрометр фирмы «Брукер».

Облучение образцов БСА при анализе с помощью УФ спектроскопии проводилось в герметичных цилиндрических кюветах из твердого полистирола. Величина оптической плотности материала кюветы на длине волны облучения была $\sim 0,35$. Диаметр кюветы 8 мм. Измерение интенсивности УФ спектров облученных и контрольных образцов БСА проводилось на длине волны 275 нм. Анализировались водные растворы БСА, концентрация которых составляла 1 мг/мл. Растворы готовились растворением навески облученного или контрольного сухого порошка БСА в деионизованной воде. УФ спектры поглощения водных растворов были получены на спектрометре фирмы «Хьюлетт-Паккард».

Результаты

Температура кювет в ИК и в УФ экспериментах за время 9-минутного облучения светом лазера не превышала 35 °С. Таким образом, внешняя температура кюветы в лазерном

эксперименте всегда была меньше температуры в экспериментах по термическому нагреву.

На рис. 1 представлен типичный исходный ИК спектр поглощения порошка аль-

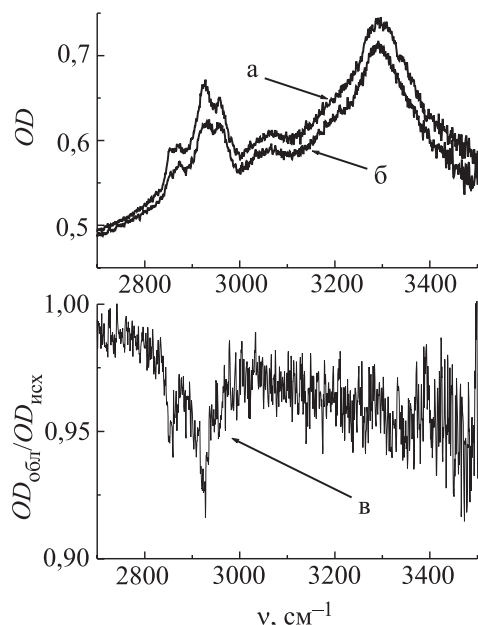


Рис. 1. ИК спектры поглощения БСА до (а) и после (б) облучения; отношение спектров облученного и контрольного образцов БСА (в). OD_{obl} и OD_{isx} — оптические плотности облученного и исходного образцов соответственно

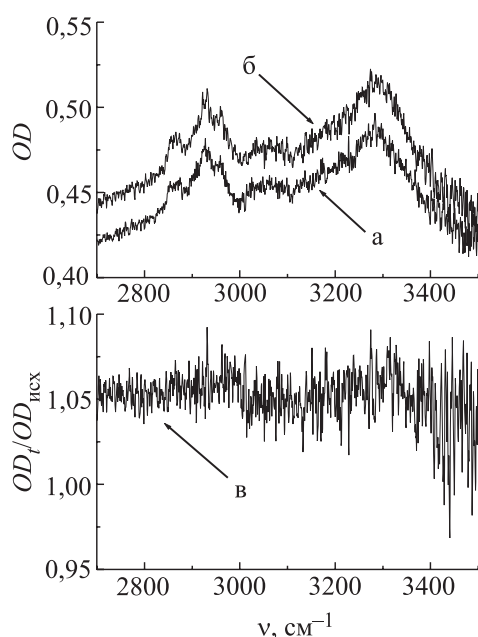


Рис. 2. ИК спектры поглощения БСА до (а) и после (б) нагрева; отношение спектров нагретого и исходного образцов БСА (в). OD_t и OD_{isx} — оптические плотности нагретого до 55 °С и исходного образцов соответственно

бумина (а). Спектр характеристических частот в области $\nu = 2\,700\text{--}3\,500\text{ см}^{-1}$ в основном обусловлен валентными колебаниями CH_2 , CH_3 , NH , NH_2 и OH групп молекулы БСА [10]. Этот спектр находится на фоне, обусловленном наличием интенсивного рассеяния веществом образца и поглощением тefлоновых окон. Также показан ИК спектр поглощения порошка альбумина после 3-минутного облучения излучением ЛСЭ (б) с длиной волны $\lambda = 127\text{ мкм}$ при мощности 250 мВт. Аналогичные эффекты в ИК спектрах поглощения наблюдались при использовании длин волн в диапазоне перестройки 120–140 мкм и мощностей в диапазоне перестройки 130–300 мВт. Как видно из сравнения этих спектров, наблюдается уменьшение интенсивности линии характеристических частот. Этот эффект отчетливо виден на рис. 1 (в), на котором представлено отношение спектров облученного и исходного образцов. На $\nu = 2\,930\text{ см}^{-1}$ (характеристическая линия) с вычетом фона эффект уменьшения интенсивности облучения составляет $(40 \pm 20)\%$.

Нагрев образцов с помощью воздушной конвекции в термостате или с помощью направленного потока горячего воздуха от тепловой пушки с температурой до 55 °С не приводит к изменению интенсивности характеристических ИК спектров поглощения (рис. 2). Таким образом, излучение ЛСЭ и термический нагрев действуют на образцы БСА различно.

Сравнение рис. 1 (в) и 2 (в) показывает, что в результате облучения интенсивность фона на $\nu = 2\,800\text{ см}^{-1}$ уменьшается, а в результате нагревания растет. Однако уменьшение интенсивности фона при облучении лазером образцов БСА наблюдалось не всегда. Оно имело место для 14 экспериментов из 22. В 8 экспериментах результат был аналогичен наблюдаемому при термическом нагреве — наблюдался рост интенсивности фона. Однако при этом всегда наблюдалось уменьшение структурированной части спектра. Напротив, при термическом нагреве рост поглощения на $\nu = 2\,800\text{ см}^{-1}$ наблюдался во всех 11 проведенных экспериментах при неизменной величине поглощения структурированной части спектра. Различие в фоне, по-видимому, связано с неконтролируемыми и необратимыми морфологическими изменениями образца в кювете при тер-

мическом расширении, которое имело место в обоих типах экспериментов. Физическими причинами, которые могли приводить к различию морфологических изменений образцов при лазерном и термическом нагревах, являются следующие: 1) температура при лазерном нагреве всегда была меньше, чем при термическом; 2) в лазерном эксперименте градиент температуры был больше, чем в термическом, поскольку в термическом эксперименте нагрев кюветы имел место со всех сторон, в то время как при лазерном только с одной стороны. Однако, по-видимому, иногда в экспериментах с лазерным облучением, материал образца случайно претерпевал изменения, при которых конечная деформация структуры образца была подобна конечной деформации образца в экспериментах с термическим нагревом, что и давало одинаковую направленность изменения интенсивности фона в ИК спектрах в экспериментах с термическим нагревом и лазерным воздействием. Нужно заметить, что изменения интенсивности поглощения фона не велики и составляют несколько процентов, однако принципиальным в этом наблюдении является то, что в термическом эксперименте всегда наблюдался рост поглощения, а в лазерном – как рост, так и уменьшение.

На рис. 3 представлены УФ спектры поглощения облученного и исходного образцов БСА. Как видно из этого рисунка, после облучения образца интенсивность поглощения на $\lambda = 275$ нм уменьшается приблизительно на 40 %. Это означает, что количество структурных групп, обуславливающих характерное поглощение белков на $\lambda = 270$ –290 нм, уменьшается. Эксперименты, проведенные с термически нагреваемыми образцами БСА, показали отсутствие каких-либо изменений в УФ спектрах поглощения. В пределах экспериментальной погрешности ± 1 % также не наблюдалось изменений в УФ спектрах поглощения БСА при облучении его водных растворов.

Резюмируя наблюдаемые факты, заключаем, что в результате лазерного облучения с длиной волны 120–140 мкм концентрация исходного БСА, по данным ИК и УФ спектроскопии, уменьшается на 40 %.

Обсуждение результатов

Интенсивность структурированной части ИК спектров после учета фона определяется величиной поглощения образца.

Следовательно, отсутствие изменения интенсивности структурированной части спектра в области поглощения СН, NH и OH колебаний при термическом нагреве связано с тем, что концентрация характеристических групп при нагреве не меняется. Это означает отсутствие разрыва химических связей. Напротив, при лазерном облучении имеет место разрыв химических связей. Об этом свидетельствует уменьшение интенсивности структурированной части ИК спектра поглощения. Дополнительным аргументом в пользу этого заключения является уменьшение интенсивности УФ спектра «белкового» поглощения образцов БСА на $\lambda = 275$ нм. Физическими процессами, которые могут приводить к разрыву химических связей, при взаимодействии терагерцового излучения с сыпучим сухим веществом, которым является БСА, являются термическая деструкция, лазерная абляция и лазерный свеллинг.

Термическая деструкция. При облучении светом ЛСЭ в результате поглощения и соответственно нагрева неизбежно имеет место деструкция образца БСА. Процессами, приводящими к разрушению, могут быть спекание, агломерация и т. д. В результате, по данным ИК спектроскопии, количество молекул, содержащих СН₂, СН₃, NH, NH₂ и OH группы, должно уменьшаться, если происходит разрушение исходных молекул и образование продуктов, в которых доля молекул, имеющих указанные группы, меньше. Также будет уменьшаться интенсивность спектров УФ поглощения на $\lambda = 275$ нм из-за деструкции исходной молекулы БСА. Такой химический процесс, сопровождающийся уменьшением концентрации характеристических групп, например, хорошо известен для процесса гумификации, когда в результате химических

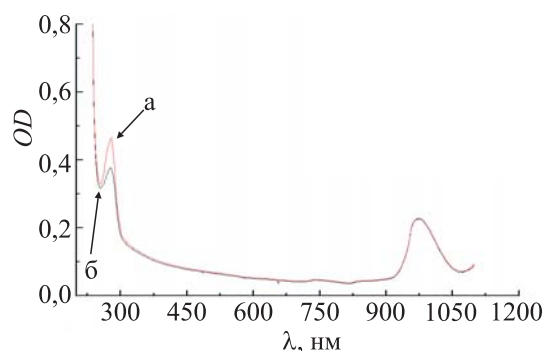


Рис. 3. Спектры УФ поглощения образцов БСА до (а) и после (б) облучения

превращений в почве со временем происходит рост отношения C/H , C/N , C/O и т. д. Увеличение величин этих отношений свидетельствует о росте ароматичности исследованных систем и соответственно об уменьшении количества CH_2 , CH_3 , NH , NH_2 и OH групп [11]. Следует заметить, что если в процессе «терагерцовой» деструкции (спекание, агломерация) превалирующую роль играет процесс сгорания (окисление), то в этом случае на степень деструкции будет влиять наличие кислорода. В связи с этим весьма интересным представляется проведение экспериментов по облучению терагерцовым излучением образцов БСА в обескислороженной среде.

Лазерная абляция. Эффект лазерной абляции – отрыв (испарение) некоторой массы облучаемого вещества от основной, в условиях нашего эксперимента также мог давать вклад в наблюдаемые спектральные изменения. Действительно, испарение может сопровождаться разрывом химических связей, что будет приводить к уменьшению интенсивности поглощения как ИК, так и УФ спектров, и поскольку эксперименты проводились в закрытом объеме (продукты абляции не исчезали), то это уменьшение регистрировалось как уменьшение концентрации характеристических групп.

Лазерный свеллинг. В условиях нашего эксперимента проявление эффектов лазерного свеллинга для биообъектов и полимеров [12; 13] (необратимое образование бугорков микронного размера на облучаемой поверхности) тоже реально. Его наличие может давать вклад в изменение интенсивности рассеяния и поглощения. Образование бугорков может приводить к изменению формы поверхности облучаемого образца и, следовательно, к изменению его отражающей и поглощающей способности. Эти изменения спектральных свойств образцов БСА должны проявляться в изменении величины фона (подложки) ИК спектров. При этом величина поглощения структурированной части спектра, определяемой количеством характеристических групп, может не меняться, если не происходит разрыва химических связей, поскольку их концентрация не претерпевает изменений и, напротив, может меняться, если происходит разрыв химических связей. Таким образом, наблюдаемые изменения интенсивности рассеяния и поглощения ИК

спектров образцов БСА не противоречат наличию лазерного свеллинга.

Подобные эффекты изменения интенсивности в спектрах ИК и УФ поглощения после воздействия терагерцового излучения наблюдались для сухих (порошкообразных) образцов молекул трипсина, триптофана, гуминовых кислот, паратерфенила. Интерпретация изменений спектров в рамках представлений о наличии термической деструкции, лазерной абляции и лазерного свеллинга не вызывает затруднений.

Полученные данные позволяют сделать следующее осторожное общее предположение. Воздействие терагерцового излучения на порошкообразные вещества всегда приводит к образованию агломератов, под которыми мы подразумеваем частицы, у которых на поверхности (или ее части) находятся претерпевшие деструкцию молекулы, а под этой поверхностью находятся неповрежденные исходные молекулы. В случае наличия исходной сплошной поверхности будет иметь место процесс ее спекания с образованием «корочки», и соответственно под «корочкой» будут находиться молекулы, не подверженные действию лазерного излучения. Дополнительным аргументом в пользу экранирующего действия образовавшейся «корочки» служат результаты по наблюдению зависимости эффекта разрыва химических связей от дозы. Эти зависимости имеют монотонно уменьшающийся вид с выходом на плато, которое соответствует доле разорванных связей не более 0,15. Это означает, что глубина превращения заведомо меньше 100 %, что и должно быть в случае неполного разрушения исходного вещества.

Предположение о возникновении агломератов позволяет провести альтернативное объяснение результатов работ [8; 7], в которых изучалось действие лазерного излучения на сухие биообъекты. Действительно можно принять, что в работе [8] также имели место процессы деструкции, абляции и свеллинга исходных образцов БСА. Однако для части оставшихся «неповрежденных» молекул активность белков была не нарушена, что и было зарегистрировано в эксперименте. Наблюдаемые эффекты уменьшения эффективности связывания молекулы БСА с молекулой-зондом являются количественным проявлением полного разрушения молекул БСА.

В рамках предположения о сохранении структуры и активности «внутренней» части образцов биомолекул при лазерном воздействии возможна и интерпретация результатов по мягкой абляции работы [7]. В ней анализ данных о размерах частиц, полученных в результате абляции, показал, что количество молекул в такой частице составляет порядка 10^3 . Таким образом, легко представить, что в частице, подвергшейся абляции, «внутренние» биомолекулы сохранили свои структурные и функциональные свойства и не подверглись разрушению в результате лазерного воздействия, что привело к сохранению биологической активности, которая наблюдалась экспериментально.

Заключение

Облучение лиофилизированных препаратов БСА ИК излучением в диапазоне длин волн 220–240 мкм мощностью 130–300 мВт приводит к уменьшению интенсивности характерных полос поглощения в ИК и УФ спектрах. Термический нагрев не приводит к таким спектральным изменениям. Изменения в спектрах поглощения при облучении образцов БСА могут быть объяснены в рамках представлений о наличии эффектов деструкции, абляции и свеллинга. Отдать предпочтение в пользу преобладающего действия одного из них пока не представляется возможным. Наиболее вероятной причиной изменения спектров ИК и УФ поглощения представляется совместное действие всех перечисленных эффектов.

Список литературы

1. *Grosse E.* THz radiation from free electron lasers and its potential for cell and tissue studies // *Phys. Med. Biol.* 2002. Vol. 47. P. 3755–3760.
2. *Zhengyu M.* Biological research by optically pumped far infrared lasers // *Infrared Phys.* 1989. Vol. 29. P. 631–636.
3. *Fedorov V. I., Popova S. S., Pisarchik A. N.* Dynamic effects of submillimeter wave radiation on biological objects of various levels of organization // *Intern. J. Infrared and Millimeter Waves.* 2003. Vol. 24. No. 8. P. 1235–1252.
4. *Dlott D. D., Fayer M. D.* Applications of infrared free-electron lasers: basic research on the dynamics of molecular systems // *IEEEJ. Quantum Electron.* 1991. Vol. 27. P. 2697–2713.
5. *Xie A., Meer A. F. G., Hoff W., Austin R. H.* Excited-state life times of far infrared collective modes in proteins // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88. P. 018102/1-4.
6. *Ильина С. А., Бакашина Г. Ф., Гайдук В. И. и др.* О возможной роли воды в переносе действия миллиметрового излучения на биообъекты // *Биофизика.* 1979. Т. 24, вып. 3. С. 513–518.
7. *Петров А. К., Козлов А. С., Тарабан М. Б. и др.* Мягкая абляция биологических объектов под воздействием субмиллиметрового излучения лазера на свободных электронах // *ДАН.* 2005. Т. 404, вып. 5. С. 698–700.
8. *Govorun V. M., Tretiakov V. E., Tulyukov N. N. et al.* Far infrared radiation effect on the structure and properties of proteins // *Infrared and Millimeter Waves.* 1991. Vol. 12. P. 1469–1474.
9. *Bolotin V. P., Kairan D. A., Knyazev B. A. et al.* Status of Novosibirsk free electron laser and first experiments with high power teragertz radiation: Preprint of Institute of Nuclear Physik. Novosibirsk, 2004.
10. *Nakamoto K.* Infrared spectra of inorganic and coordination compounds. N. Y.; L.: John Wiley & Sons, Inc., 1965.
11. *Лаврик Н. Л., Дергачева М. И., Ковалева Е. И.* Применение методов ИК и люминесцентной спектроскопии для изучения структурных свойств гуминовых кислот // *Химия в интересах устойчивого развития.* 2000. Т. 8. С. 815–821.
12. *Малышев А. Ю., Битюрин Т. М.* Модель лазерного свеллинга полимеров при воздействии наносекундных импульсов // *Квантовая электроника.* 2005. Т. 35, вып. 9. С. 825–830.
13. *Malyshev A. Yu., Bityurin T. M.* Laser swelling of soft biological tissue by IR pulses // *Appl. Phys.* 2004. Vol. A 79. P. 1175–1179.

Б. А. Князев ^{1,2}, В. Ан (W. An) ³, Г. Блюм (H. Bluhm) ³, Ю. А. Деулин ²,
А. А. Дорошкин ¹, А. Н. Матвеев ^{1,2}, К. А. Насыров ⁴, В. С. Черкасский ¹

¹ Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: cherk@phys.nsu.ru

² Институт ядерной физики им. Будкера СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 11, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: knyazev@inp.nsk.su

³ Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, D-76021 Karlsruhe, Germany
E-mail: an@ihm.fzk.de

⁴ Институт автоматики и электрометрии СО РАН
пр. Коптюга, 1, Новосибирск, 630090, Россия

ШИРОКОПОЛОСНЫЕ МОЩНЫЕ ИМПУЛЬСНЫЕ ЛАЗЕРЫ НА КРАСИТЕЛЯХ ДЛЯ КАСКАДНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ВЕРХНИХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ЛИТИЯ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ *

Резонансная флуоресценция пробных атомов, возбуждаемая лазерами на красителях, является эффективным методом исследования различных сред. Эта техника применяется, в частности, для исследования процессов в ускоряющих промежутках мощных импульсных ускорителей электронов и ионов с характерной величиной напряженности электрического поля 0,1–4 МВ/см. Для исследования распространения возникающих на электродах промежутка катодной и анодной плазм и измерения распределения напряженности электрического поля было предложено использовать метод, основанный на инжекции в промежуток атомов лития и насыщенном возбуждении с помощью двух лазеров на красителях нижнего перехода $2s-2p$ и расщепленных электрическим полем компонент перехода $2p-3d$ или $2p-4d$. Расчет штарковского расщепления линий атома лития, соответствующих переходам $2s-2p-3d$, показал, что для возбуждения компонентов расщепленной линии ширина генерации лазера, возбуждающего $2p-3d$ переход, должна быть не менее 4 нм. Сконструированы и изготовлены импульсные лазеры на красителях, обеспечивающие необходимые длины волн и ширины полос генерации. Лазер на растворе оксазина 17 ($\lambda = 671$ нм) полностью обеспечивает возбуждение нижнего перехода. Показано, что лазер на растворе родамина В в изопропанол (е) ($\lambda = 610$ нм) способен генерировать излучение с шириной полосы 4–6 нм в течение не менее 2,5 мкс, что значительно превышает характерную длительность исследуемого процесса (0,1 мкс). Спектральная плотность мощности излучения обоих лазеров значительно превышает величину, необходимую для обеспечения насыщенного возбуждения каскадных переходов. Максимальная энергия импульса генерации в лазере данной конструкции получена на растворе родамина 6G в этаноле и составила 12 Дж. На протонном ускорителе KALIF создана и успешно испытана диагностическая система с инжекцией литиевого пучка в диодный промежуток. Разработанная аппаратура может быть использована в самых разнообразных системах типа «накачка-зондирование».

Ключевые слова: лазеры на красителях, эффект Штарка, атом лития, резонансная флуоресценция.

Введение

Лазеры на красителях, в сравнении с другими типами лазеров, обладают рядом уникальных характеристик, которые делают их незаменимыми в целом ряде прикладных задач (см., например, [1–3]). Одной из наиболее

важных особенностей лазеров на красителях является возможность перестройки длины волны генерации в очень широких пределах. Обычно удается перестраивать длину волны в пределах 30 нм. Второй важной особенностью является возможность генерации широкополосного излучения.

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Исследовательского центра Карлсруэ (Forschungszentrum Karlsruhe, Germany), программы фундаментальных исследований «Университеты России», Министерства образования и науки РФ (проект РНП 2.1.1.3846) и РФФИ (проект № 07-02-13547). Авторы благодарят Г. Кесслера (G. Kessler) за постоянную активную поддержку данной работы, И. Б. Хрипловича и А. М. Шалагина за полезные обсуждения, а также Ю. В. Иванцева, С. С. Коптелова, С. В. Лебедева и О. А. Белобородову за помощь при проведении экспериментов и обработке экспериментальных данных. Б. А. Князев благодарен также Германской службе академических обменов (DAAD), предоставившей краткосрочный грант для выполнения экспериментов в Германии.

Ширина спектра может составлять несколько нанометров (величина, не достижимая для газовых и твердотельных лазеров). Наконец, третья важная для приложений особенность — «естественная» длительность импульса генерации лазеров на красителях с ламповой накачкой составляет несколько микросекунд. Это позволяет рассматривать их как квазистационарный источник излучения при исследовании процессов длительностью меньше микросекунды.

Эти особенности лазеров на красителях были использованы при разработке импульсного лазера, предназначенного для возбуждения резонансной флуоресценции атомных систем, имеющих несколько близко расположенных или расщепленных внешними полями уровней. Непосредственной причиной разработки лазеров послужила необходимость создания системы для бесконтактной диагностики плазмы методом резонансной флуоресценции в мощных ускорителях электронов и ионов, предложенным в работах [4–7]. Задача создания широкополосных лазеров с энергией от одного до десяти джоулей не является столь уж тривиальной, поскольку наряду с вышеуказанными достоинствами лазеры на красителях имеют и ряд недостатков. Во-первых, растворы красителей подвержены фотохимической деградаци, приводящей к снижению мощности, а затем и прекращению генерации. Во-вторых, генерационные характеристики мощных лазеров на красителях часто недостаточно хорошо воспроизводятся от импульса к импульсу.

В настоящей работе выполнен анализ требований, которые предъявляются к характеристикам лазеров, предназначенных для возбуждения верхних уровней атомов лития, описана конструкция разработанного нами лазера, исследованы операционные характеристики лазера при использовании в качестве рабочего вещества растворов родамина 6G, родамина В и оксазина 17. Найдены условия, при которых характеристики описываемых лазеров полностью обеспечивают проведение экспериментов по возбуждению расщепленных электрическим полем верхних уровней атома лития в электрических полях.

Требования к лазерам

Схема каскадного возбуждения высоколежащих уровней атома лития для измере-

ния электрических полей в плазме и вакууме была предложена в работе [4]. Впервые она применена в экспериментах [5] по измерению распределения напряженности электрического поля в ускоряющем промежутке электронного ускорителя У-1, во время генерации четырехмикросекундного импульса электронов при приложенном напряжении 0,9 МВ. Энергосодержание электронного пучка, выходящего из ускоряющего промежутка, достигало 110 кДж. Электрическое поле в ускоряющем диоде с расширяющейся от катода плазмой измерялось по штарковскому расщеплению перехода $4d-2p$ атомов литиевого пучка, создававшегося путем лазерной абляции мишени из металлического лития.

В этих экспериментах верхний рабочий уровень заселялся путем насыщенного лазерного возбуждения переходов $2s-2p-4d$ двумя лазерами на растворах оксазина 17 и кумарина 1. Эксперименты позволили найти распределение электрического поля поперек шестисантиметрового ускоряющего промежутка, зарегистрировать движение границы плазмы, распространявшейся от катода, обнаружить момент образования анодной плазмы, проследить за ее движением и зафиксировать завершающее процесс замыкание промежутка.

В 1997 г. исследовательскими группами из Новосибирского госуниверситета и Исследовательского центра Карлсруэ (Forschungszentrum Karlsruhe) были начаты совместные работы по созданию установки для исследования процессов в вакуумном ускоряющем диоде импульсного ускорителя протонов Karlsruhe Light Ion Facility – KALIF (50-нс, $0,15\text{--}1\text{ ТВт/см}^2$) [8], предназначавшегося для экспериментов по инерциальному термоядерному синтезу. Поскольку напряженность электрического поля в диоде KALIF достигала величины 3–4 МВ/см и расщепление уровня $4d$ становилось слишком большим, то в качестве рабочего перехода был выбран переход $2p-3d$. Схема уровней, вовлеченных в этом случае в столкновительно-излучательные процессы, показана на рис. 1. Расчеты величины штарковского расщепления и интенсивностей компонентов $2p-3d$ перехода приведены в приложении. Интенсивность излучения возбуждающего переход лазера на красителе должна быть достаточной для насыщения обоих переходов каска-

да, но не слишком большой, чтобы исключить потери атомов за счет фотоионизации с верхних состояний (показана пунктиром). Для возбуждения компонентов расщепленной в электрическом поле спектральной линии $2p-3d$ перехода необходимо применять лазер с шириной спектра генерации не менее 4 нм. Если ширина спектра составит 7–8 нм, то все компоненты при не слишком высоких напряженностях поля могут быть возбуждены одновременно.

Мощность лазера на красителе для возбуждения резонансной флуоресценции может быть оценена следующим образом. Используя стандартные обозначения (см., например, [9]), запишем кинетическое уравнение для населенности верхнего уровня m двухуровневой системы (n и m) в поле резонансного излучения:

$$\frac{dn_m}{dt} = n_n \int j_L(\omega) \sigma_{mn}(\omega) d\omega - n_m \int [j_L(\omega) \sigma_{mn}(\omega) + a_{mn}(\omega)] d\omega, \quad (1)$$

где

$$\int a_{mn}(\omega) d\omega = A_{mn},$$

$$\sigma_{mn} = \frac{a_{mn} \lambda^2}{4}.$$

Переход считается насыщенным внешним излучением j_L^S , если

$$j_L^S(\omega) \sigma_{mn}(\omega) = a_{mn}(\omega).$$

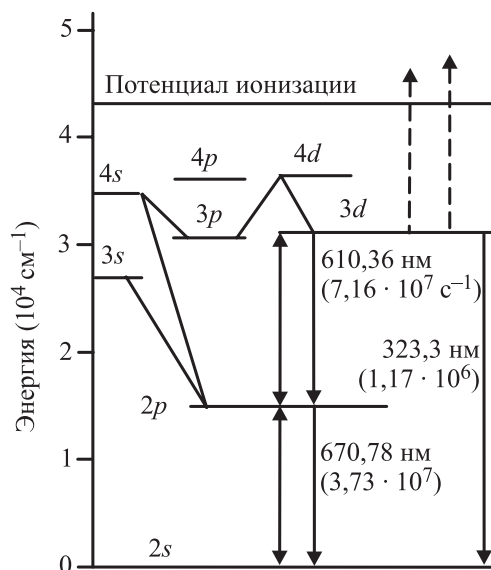


Рис. 1. Схема уровней атома лития; цифрами указаны длины волн и вероятности (в скобках) переходов

Следовательно, насыщение достигается при потоке фотонов

$$j_L^S(\omega) = \frac{a_{mn}}{\sigma_{mn}} = \frac{4}{\lambda^2} (1/\text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}).$$

Переходя к плотности мощности, получим

$$J_L^S(\omega) = j_L^S \cdot \hbar\omega = \frac{4\hbar\omega}{\lambda^2} (\text{эрг}/\text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1})$$

На практике удобнее иметь дело с интенсивностью насыщения как функцией длины волны. После несложных преобразований получим

$$J_\lambda^S = \frac{16\pi^2 \hbar c^2}{\lambda^5} (\text{эрг}/\text{см}^2 \cdot \text{см})$$

или

$$J_\lambda^S = \frac{1,42 \cdot 10^{14}}{\lambda^5 [\text{нм}]} (\text{кВт}/\text{см}^2 \cdot \text{нм}). \quad (2)$$

Это выражение справедливо, если ширина линии генерации лазера больше ширины линии атома. Интенсивность насыщения зависит только от длины волны. Для интересующих нас длин волн насыщение достигается при спектральной плотности мощности 1,7 кВт/см²·нм для 610 нм и 1,0 кВт/см²·нм для 671 нм. Как будет показано далее, требуемые значения плотности мощности достигаются достаточно легко.

Следующий интересующий нас параметр – длительность импульса генерации. Длительность импульса напряжения на диоде KALIF не превышает 0,1 мкс. Следовательно, для создания постоянной интенсивности возбуждающего лазера, длительность его импульса должна быть не менее 1 мкс. Так как KALIF работает в режиме одиночных импульсов, требования к частоте повторения импульсов лазера нет.

Наиболее критическим параметром является ширина спектра генерации лазера, возбуждающего верхний переход. Расчеты штарковского расщепления $2p-3d$ перехода атома лития приведены в приложении. Из них следует, что при величине электрического поля 4 МВ/см сдвиг компонента линии с $m = 2$ равен 3,5 нм, следовательно, ширина спектра генерации лазера на длине волны 610 нм должна быть не менее этой величины.

Конструкция лазера

Схема лазера, разработанного в Новосибирском государственном университете, показана на рис. 2. В качестве прототипа был использован лазер с накачкой самодельной коаксиальной лампой, описанный в работе [10], генерировавший излучение микросекундной длительности с максимальной энергией в импульсе до пяти джоулей при использовании раствора родамина 6G.

В новой конструкции в качестве источника возбуждения использовалась полостная коаксиальная лампа CANDELLA CL1050. Внутри лампы располагалась кювета с двойными стенками. По внешней кольцевой полости прокачивался водный раствор CuSO_4 , отсекавший коротковолновое излучение лампы, что обеспечивало длительный срок жизни красителя, прокачивавшегося по внутренней цилиндрической трубке. Импульс напряжения подводился к лампе высоковольтным кабелем 2125 Dielectric Science Inc. через малоиндуктивные контакты. Диэлектрические зеркала монтировались на юстировочных головках, опиравшихся на кольца из силиконовой резины, которые одновременно служили в качестве уплотнения для раствора красителя. Практика показала, что контакт спиртовых растворов красителей с силиконовой резиной не ухудшал генерационные характеристики лазера. Несмотря на крайнюю простоту конструкции, юстировочное устройство обеспечивало длительную надежную работу лазера.

Нами изготовлены три экземпляра лазера, два из которых были предназначены для

каскадного возбуждения переходов в литии, а третий, работавший на растворе родамина 6G, применялся для формирования атомарного пучка методом абляции тонких пленок лития со стеклянной поверхности [11].

Испытание возможностей лазера было первоначально проведено на растворах родамина 6G, поскольку это наиболее эффективный из известных на настоящее время красителей. При испытаниях раствора родамина 6G в изопропиловом спирте, выполненных в НГУ на установке КАТРИОН, была получена энергия генерации 2,5 Дж. Впоследствии этот же лазер был испытан в Исследовательском центре Карлсруэ, где на растворе родамина 6G в этаноле была получена максимальная энергия 12 Дж за импульс. Поскольку наши предыдущие исследования показали, что энергия генерации не очень сильно отличается для растворов родамина 6G и оксазина 17, это означает, что использовавшийся в первых экспериментах изопропанол был недостаточно чист. Поэтому приведенные ниже энергетические характеристики всех лазеров следует рассматривать как нижний предел.

Спектрально-временные характеристики растворов оксазина 17 и родамина В в изопропанол

Исследования характеристик лазеров на красителях, предназначенных для ступенчатого возбуждения $3d$ состояния лития, были проведены на установке, схема которой показана на рис. 3.

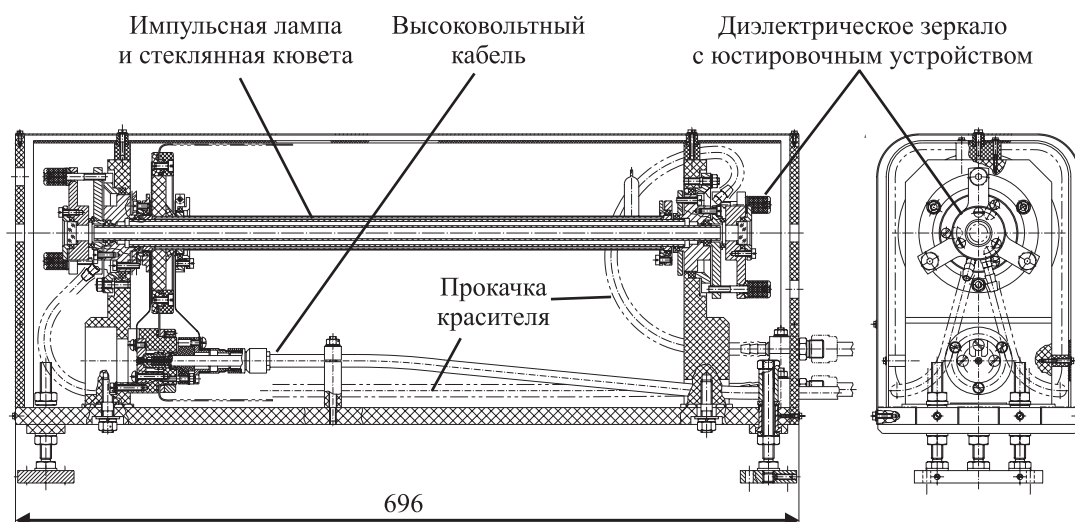


Рис. 2. Схема лазера на красителе

Все сигналы снимались осциллографом Tektronix TDS-220 и записывались на ПК. Напряжение на конденсаторах импульсного генератора и ток в цепи измерялись с помощью делителя и пояса Роговского с аналоговым интегратором. Лазерное излучение, выходящее через «глухое» 99,8 % зеркало, расщеплялось светоделителем. Часть этого излучения направлялась на вакуумный фотодиод для регистрации формы импульса, а оставшееся излучение через световод подводилось к монохроматору с многоканальным регистратором OSMA IRY-1024. Временное разрешение регистратора, определявшееся длительностью отпирающего импульса, составляло 15 нс, в то время как длительность импульса

генерации была 1–3 мкс. Спектральное разрешение в данных экспериментах составляло около 0,06 нм. Спектр генерации регистрировался для нескольких моментов времени в течение импульса. Почти вся энергия генерации выводилась через второе сменное зеркало, в качестве которого использовались стеклянное окно (коэффициент отражения $R \approx 4\%$) или многослойные диэлектрические зеркала с коэффициентами отражения 30 и 70 %, и собиралась с помощью линзы в приемное устройство калориметра ИМО-2.

Форма импульсов генерации для растворов оксазина 17 и родамина В в изопропанолe при разных концентрациях растворов и разных коэффициентах отражения выход-

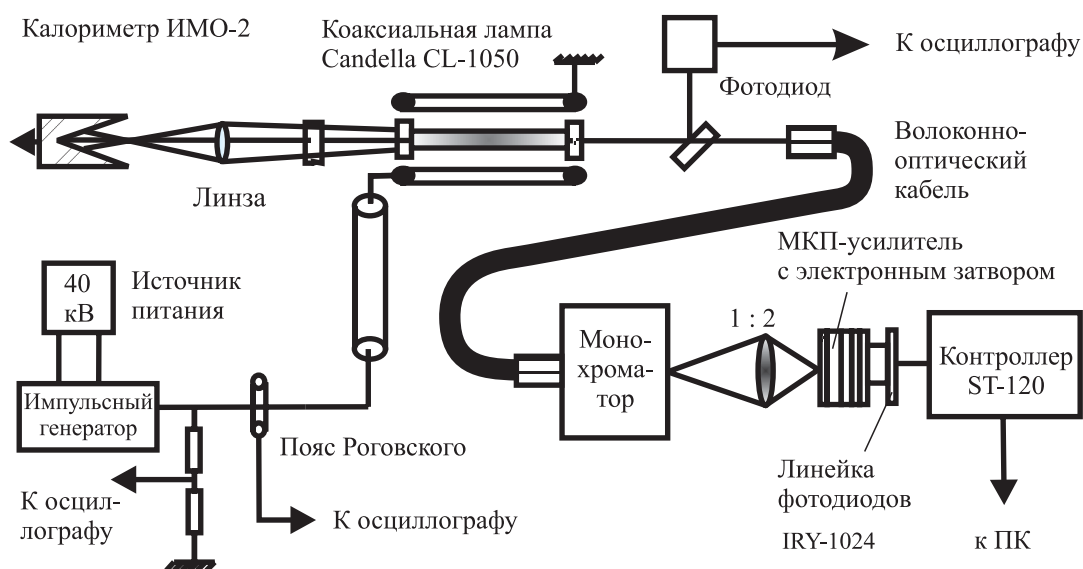


Рис. 3. Установка для испытания лазеров на красителях

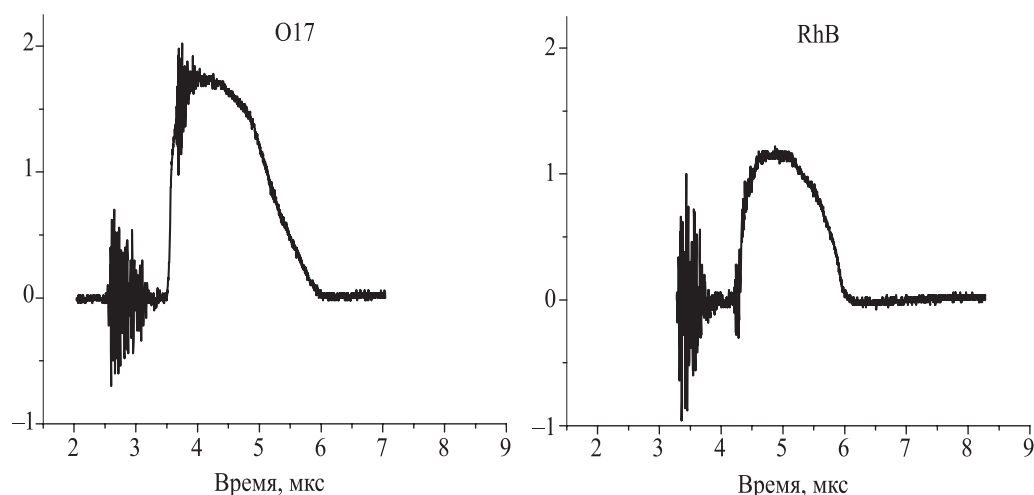


Рис. 4. Форма импульсов генерации растворов оксазина 17 и родамина В при концентрации растворов $1 \cdot 10^{-4}$ М/л и коэффициенте отражения выходного зеркала 30 %

ного зеркала приведена на рис. 4–6. Наводка перед импульсом генерации отмечает момент запуска импульсного генератора.

Энергия импульсов генерации, измеренная с помощью ИМО-2, приведена в табл. 1 и 2 для разных значений концентрации растворов и коэффициента отражения зеркала. Из результатов следует, что характерная длительность импульсов генерации равна двум микросекундам. Она зависит от концентрации раствора, коэффициента отражения зеркала и не бывает меньше одной микросекунды и больше трех микросекунд. Характерная энергия генерации для всех растворов составляла при испытаниях примерно от 50 до 300 мДж.

Исследование динамики спектров генерации

В работе [12] путем развертки спектра генерации с помощью диссектора было показано, что спектр генерации лазеров на красителях в течение импульса может изменяться, причем в область как меньших, так и больших длин волн, поэтому исследование динамики спектра генерации являлось необходимым элементом подготовки к экспериментам на ускорителе KALIF.

В сжатой форме данные о динамике спектра генерации раствора родамина В и раствора оксазина 17 показаны на рис. 7 и 8. Почти все спектры были получены при напряжении 36 кВ. На рисунках ось ординат – время в микросекундах, ось абсцисс – длина волны в нанометрах. Вертикальные линии показывают длину волны нерасщепленных полей переходов в атоме Li. Концентрации раствора и коэффициент отражения выходного зеркала также указаны на рисунках.

Рис. 7, а показывает, что полоса генерации раствора оксазина 17 при концентрации $2,2 \cdot 10^{-4}$ М/л покрывает линию $2p-2s$ по крайней мере в течение 500 нс. Небольшие изменения концентрации позволяют сдвинуть полосу генерации и перекрыть эту линию в течение более длительного времени. Отметим, что даже в сильном электрическом поле штарковское расщепление и сдвиг этой линии пренебрежимо мал, поэтому заботиться о ширине линии генерации лазера на оксазине не имеет смысла – лишь бы была перекрыта невозмущенная линия.

Другие графики (рис. 7, б–г) демонстрируют сдвиг полосы генерации раствора родамина В в зависимости от концентрации и ко-

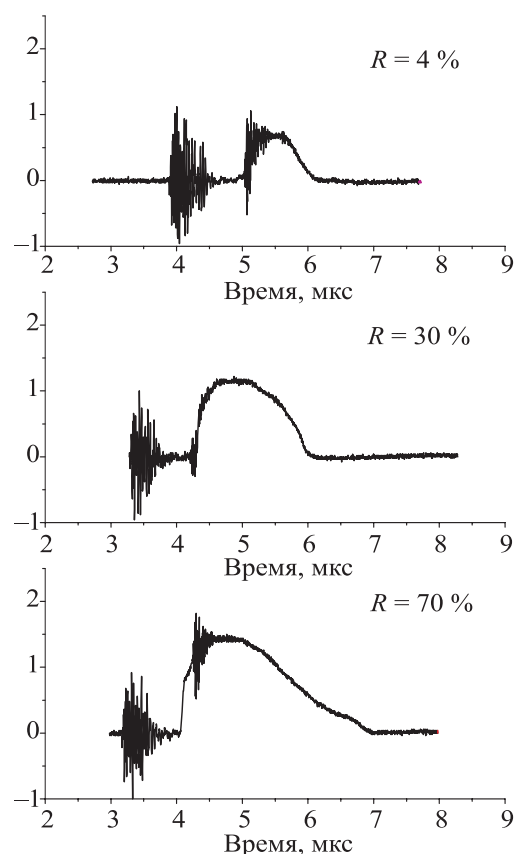


Рис. 5. Импульсы генерации раствора родамина В при разных значениях коэффициента отражения выходного зеркала

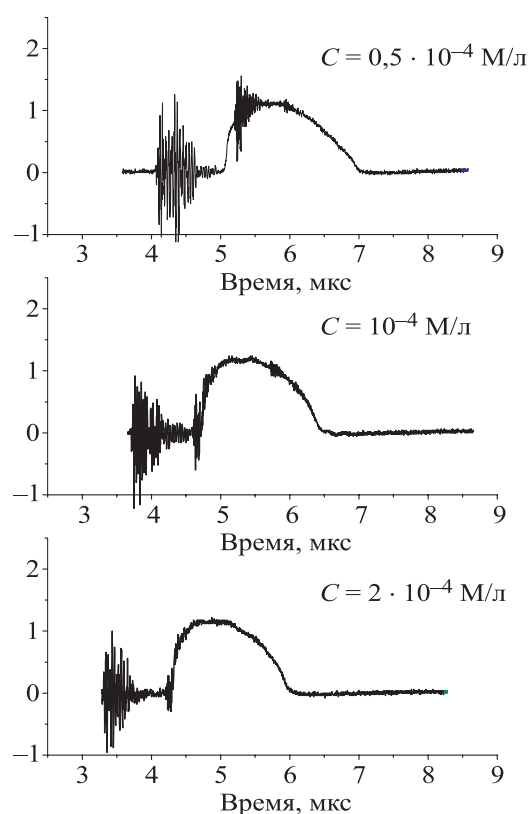


Рис. 6. Импульсы генерации раствора родамина В при различных концентрациях раствора

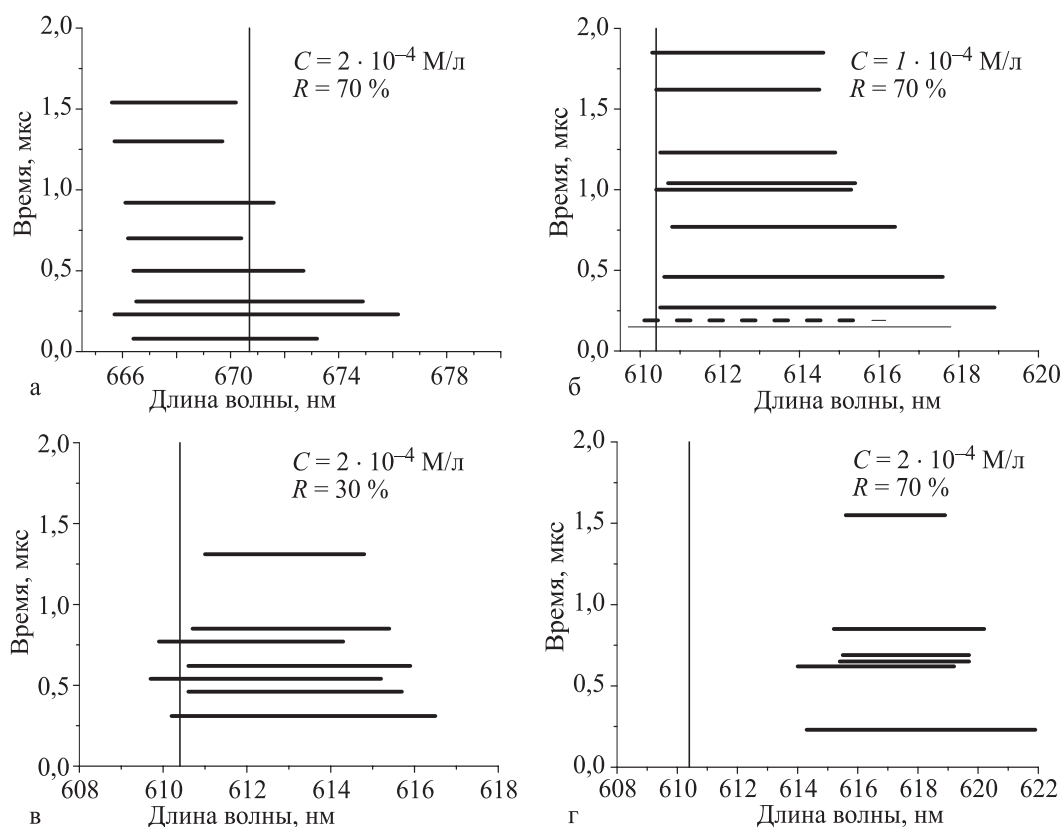


Рис. 7. Эволюция во времени полос генерации растворов оксазина 17 в этаноле (а) и родамина В в изопропанолe (б-г)

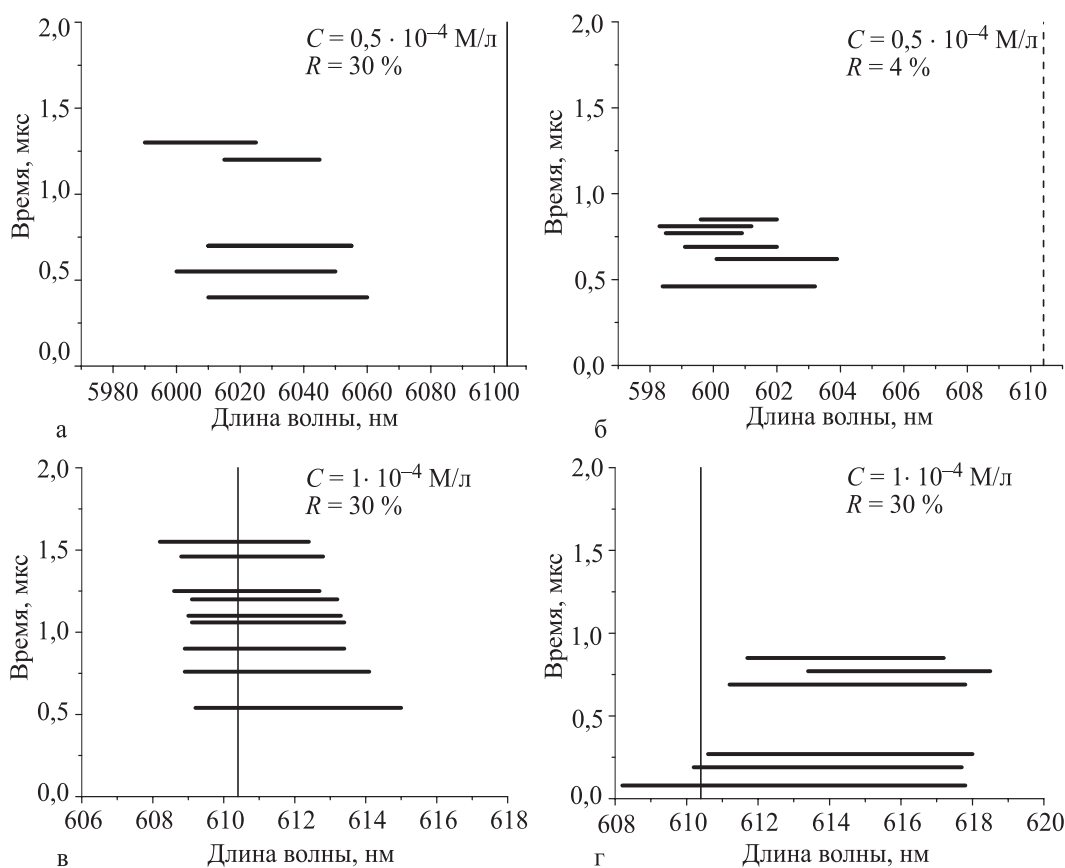


Рис. 8. Эволюция во времени полос генерации родамина В в изопропанолe

Таблица 1

Энергия генерации раствора родамина В в изопропиловом спирте (в мДж)

Коэффициент отражения, %	$C = 0,5 \cdot 10^{-4}$ М/л	$C = 1 \cdot 10^{-4}$ М/л	$C = 2 \cdot 10^{-4}$ М/л
$R = 4$	140 ± 10		160 ± 5
$R = 30$	235 ± 10	280 ± 20	185 ± 15
$R = 70$		150 ± 5	170 ± 5

Таблица 2

Генерация раствора оксазина 17 в изопропиловом спирте (в мДж)

Коэффициент отражения, %	$C = 1,1 \cdot 10^{-4}$ М/л	$C = 2,2 \cdot 10^{-4}$ М/л	$C = 3,3 \cdot 10^{-4}$ М/л
$R = 30$	47 ± 3	135 ± 5	
$R = 70$	63 ± 4	65 ± 5	55 ± 10

эффицента отражения выходного зеркала. Из рис. 8, в следует, что оптимальная концентрация раствора родамина В в изопропанол-е при коэффициенте отражения 30 % равна $1 \cdot 10^{-4}$ М/л. При этом в течение более чем одной микросекунды ширина полосы и центр линии генерации полностью удовлетворяют требованиям эксперимента по возбуждению расщепленных компонент атома лития во время импульса ускорителя KALIF (рис. 9).

Заключение

Импульсные лазеры на красителях, созданные в результате настоящей работы, имеют характеристики, позволяющие реализовать схему измерений электрических полей в вакуумных и плазменных высоковольтных устройствах, в частности в ускоряющем промежутке мощного протонного ускорителя KALIF. Это с очевидностью следует из рис. 9, на котором совмещены форма импульса лазера на растворе родамина В, экспериментально измеренные спектры генерации для разных моментов времени и положение компонент спектральной линии, соответствующей $2p-3d$ переходу в атоме лития в зависимости от величины напряженности электрического поля.

При длительности импульса порядка трех микросекунд и ширине спектра генерации 6 нм излучение, сфокусированное на площадь $0,01 \text{ см}^2$, будет удовлетворять условию (8) при энергии в импульсе 0,3 мДж для $\lambda = 610 \text{ нм}$ и 0,18 мДж для $\lambda = 671 \text{ нм}$. Отсюда следует, что мощность наших лазеров на несколько порядков величины превосходит

мощность, необходимую для насыщенного возбуждения каскадных переходов. Уменьшая ее до значений близких к оптимальным, мы обеспечим возбуждение резонансной флуоресценции нужных уровней и избежим фотоионизации $3d$ уровня.

На основе описанных в данной работе лазеров на ускорителе KALIF была создана установка для измерения сильных электри-

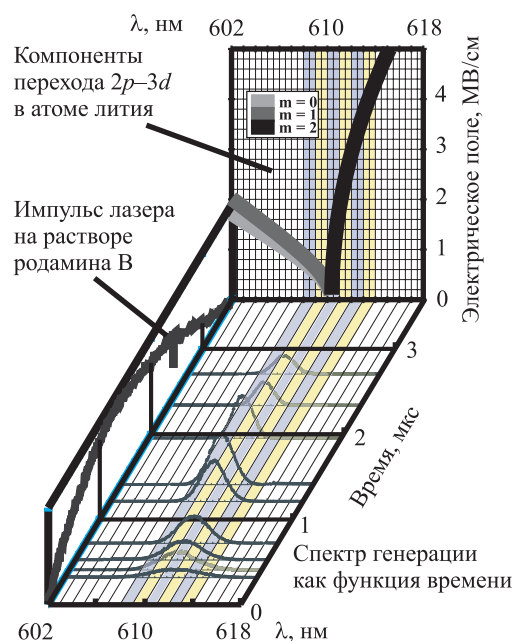


Рис. 9. Сопоставление спектральных и временных характеристик лазера на родамине В ($C = 1 \cdot 10^{-4}$ М/л, $R = 30 \%$) с положением компонент $2p-3d$ перехода в атоме лития в зависимости от величины локальной напряженности электрического поля

ческих полей. Эксперименты [13] по возбуждению резонансной флуоресценции в пучке атомарного лития, выполненные непосредственно в диоде ускорителя KALIF, продемонстрировали практическую реализуемость и работоспособность данной схемы измерений. Описание диагностической установки АШС, собранной на основе описанных лазеров на ускорителе KALIF, и результаты измерений будут описаны отдельно.

Отметим, что операционные характеристики созданных лазеров позволяют широко использовать их во многих приложениях, таких как получение облаков пара и плазмы при облучении поверхностей, создание мощных источников света для скоростной фотографии (в том числе при просвечивании исследуемого объекта), возбуждения резонансной флуоресценции, а также при комбинации с другими источниками возбуждения, для использования в системах «накачка-зондирование». В частности, может представлять интерес возбуждение лазером на красителях сложных органических молекул с их последующим зондированием импульсно-периодическим излучением терагерцового лазера на свободных электронах.

Приложение

Штарковское расщепление 2p–3d перехода в атоме лития

Вычисление Штарковского сдвига

Изменение энергии атомного состояния при внешнем возмущении вычисляется по теории возмущений второго порядка. Это изменение имеет вид

$$\Delta E_m = \sum_{n \neq m} \frac{|V_{mn}|^2}{E_m - E_n}, \quad (\text{П1})$$

где E_i – невозмущенная энергия; V_{mn} – матричный элемент возмущения. Эта формула верна, если матричный элемент возмущения мал по сравнению с разностью энергий между соответствующими уровнями. В противном случае формула должна быть преобразована. В частном случае первого уровня она приобретает вид

$$\Delta E_1 = \sqrt{\left(\frac{\Delta E_{12}}{2}\right)^2 + |V_{12}|^2} - \frac{\Delta E_{12}}{2},$$

$$\Delta E_{12} = E_1 - E_2. \quad (\text{П2})$$

Вклад остальных уровней в сдвиг первого уровня может быть учтен с помощью формулы (П1).

Эффект Штарка состоит в изменении энергии уровней под действием внешнего электрического поля. До тех пока уравнение (П1) остается справедливым, этот эффект называют *квадратичным эффектом Штарка*. Если $\Delta E_{12} \leq |V_{12}|$, то мы имеем *линейный эффект Штарка*. Нашей задачей является вычисление сдвига энергии уровней 2p и 3d лития (и соответственно расщепление линии флуоресценции для 2p–3d перехода) во внешнем электрическом поле со значением вплоть до 5 МВ/см. Для таких полей сдвиг энергии уровня 2p дается формулой (П1). Для уровня 3d необходимо учесть взаимодействие с соседним уровнем 3p. Поэтому воздействие этого состояния на сдвиг энергии уровня 3d должен вычисляться по формуле (П2), а воздействие от всех остальных уровней – по формуле (П1).

Для вычислений необходимо определить матричные элементы дипольного момента рассматриваемых уровней. Мы будем определять атомное состояние с номером энергетического уровня (i), орбитальным моментом (L) и проекцией орбитального момента (M) на ось z , выбранную вдоль вектора электрического поля F . Квадрат модуля матричного элемента взаимодействия определяется формулой из [14]

$$\begin{aligned} |\langle mL | V | nL' M' \rangle|^2 &= F^2 |\langle mL | D_z | nL' M' \rangle|^2 = \\ &= F^2 |(mL | D | nL')|^2 \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ M & 0 & M' \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $(mL | D | nL')$ – это так называемый редуцированный матричный элемент дипольного элемента, который может быть записан через силу осциллятора $f(mL; nL')$ с помощью соотношения

$$|(mL | D | nL')|^2 = -\frac{3\hbar^2 e^2}{2m} \frac{2L+1}{E_{mL} - E_{nL'}} f(mL; nL').$$

Силы осциллятора для прямых и обратных переходов связаны соотношением

$$(2L+1)f(mL; nL') = -(2L'+1)f(nL'; mL).$$

Таким образом, матричные элементы дипольного момента могут быть найдены, если известны силы осциллятора. В частности, сдвиг энергии уровня 2p, для которого выражение (П1) справедливо, дается формулой

$$\Delta E_{2pM} = -F^2 \frac{3\hbar^2 e^2}{2m(2\pi c)^2} \times \sum_{nL'} (2L+1) f(2p; nL') \lambda_{2p, nL'}^2 \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}^2 \quad (\text{ПЗ})$$

Здесь $\lambda_{2p, nL'}$ – длина волны перехода. Для уровня $3d$ энергетический сдвиг может быть записан аналогично (ПЗ), но с использованием формулы (П2).

После того как энергетический сдвиг для каждого магнитного подуровня уровней $3d$ и $3p$ вычислен, легко вычислить сдвиг соответствующих линий флуоресценции. Имеется пять линий:

- А) $3d(0) \rightarrow 2p(0)$,
- В) $3d(0) \rightarrow 2p(1)$,
- С) $3d(1) \rightarrow 2p(0)$,
- Д) $3d(1) \rightarrow 2p(1)$,
- Е) $3d(2) \rightarrow 2p(1)$.

где цифры в скобках – значения $|M|$.

Зависимость штарковского расщепления перехода $2p-3d$ лития как функция напряженности электрического поля показана на рис. 10, а. Сдвиги линий А и В, и С и Д практически одинаковы. Это можно объяснить тем, что магнитные подуровни уровня $3d$ сдвигаются в основном благодаря ближайшей линии уровня $3p$, а сдвиг подуровней $2p$ значительно меньше. Поэтому сдвиг линий А и В, которые отличаются от нижнего уровня только значением M , идентичен. Аналогичное утверждение справедливо и для линий С и Д.

Вычисление интенсивностей компонент

Для слабого электрического поля в случае перпендикулярности этого поля линии наблюдения интенсивность определенных линий пропорциональна [15]

$$W \propto \left| \langle mLM | D_0 | nL'M' \rangle \right|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} \left(\left| \langle mLM | D_{\sigma} | nL'M' \rangle \right|^2 \right) = \left| \langle mL | D | nL' \rangle \right|^2 \times \left[\begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}^2 + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ -M & 1 & M' \end{pmatrix}^2 + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ -M & -1 & M' \end{pmatrix}^2 \right]. \quad (\text{П4})$$

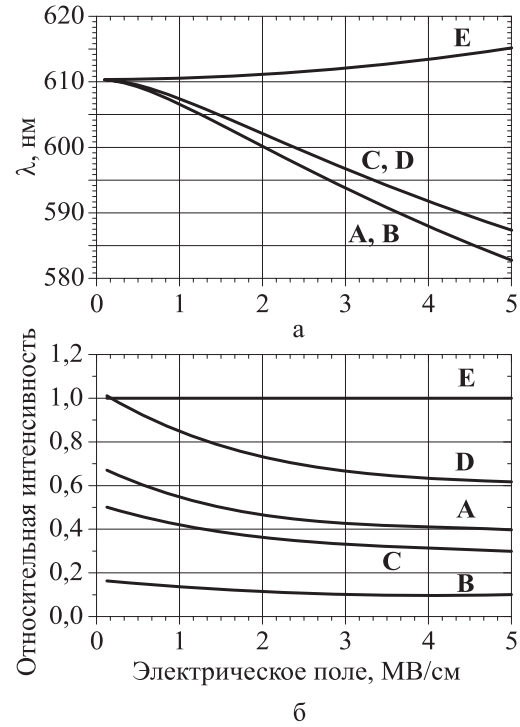


Рис. 10. Расчетное штарковское расщепление уровня $2p-3d$ лития (а); штарковское расщепление $2p-3d$ перехода и интенсивность компонент (б)

Используя это выражение, можно подсчитать относительные интенсивности линий в случае слабого поля. В результате получим

$$\begin{aligned} W_1^{(0)} &= \frac{2}{3}, \\ W_2^{(0)} &= \frac{1}{6}, \\ W_3^{(0)} &= \frac{1}{2}, \\ W_4^{(0)} &= 1, \\ W_5^{(0)} &= 1. \end{aligned}$$

При росте электрического поля эти интенсивности изменяются в соответствии с изменением волновых функций. При наличии внешнего поля волновая функция атомного состояния описывается как линейная комбинация исходной волновой функции и волновых функций других состояний. Теория возмущений дает для этого нового смешанного состояния следующее выражение:

$$\psi'_m = \psi_m + \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm}}{E_m - E_n} \psi_n, \quad (\text{П5})$$

которое справедливо до тех пор пока справедлива формула (П1). При условии близости двух уровней 1 и 2, новая волновая функция уровня 1 имеет вид

$$\psi'_1 = \frac{|V_{12}|}{\sqrt{(\Delta E_1)^2 + |V_{12}|^2}} \left[\psi_1 + \frac{\Delta E_1}{V_{12}} \psi_2 \right], \quad (\text{П6})$$

где ΔE_1 – штарковский сдвиг уровня 1.

Оценим изменение интенсивности линии в связи с примесью других состояний к нижнему уровню $2p$. В этом случае, как это следует из формулы (П5), изменение интенсивности линии будет порядка

$$\frac{V_{2p,n}}{E_{2p} - E_n} \approx \sqrt{\frac{\Delta E_{2p}}{E_{\min}}}. \quad (\text{П7})$$

Здесь ΔE_{2p} – штарковский сдвиг уровня $2p$, а $E_{\min}$ – расстояние (в энергетическом пространстве) до ближайшего уровня. Для электрического поля величиной 5 МВ/см $\Delta E_{2p} \approx 10 \text{ см}^{-1}$, в то время как $E_{\min} \approx 10^4 \text{ см}^{-1}$. Поскольку изменение энергии порядка 3 %, подмешиванием других состояний к уровню $2p$ можно пренебречь в последующих вычислениях.

В формуле (П6) предполагается, что уровень 2 является $3p$ состоянием с той же четностью, что и состояние $2p$. Это означает, что в (П6) члены, содержащие ψ_2 , не дают вклад в матричные элементы дипольного момента (П4) и соответственно в изменение интенсивности компонент. В конечном счете, все сводится к ренормализации ψ_{3d} :

$$\psi'_{3d} = \frac{|V_{12}|}{\sqrt{(\Delta E_1)^2 + |V_{12}|^2}} \psi_{3d},$$

и появлению аддитивного фактора в относительной интенсивности линий:

$$W_i = \left(1 - \frac{\Delta E_i}{2\Delta E_i + E_{3d} - E_{3p}} \right) W_i^{(0)}.$$

Здесь ΔE_i является штарковским сдвигом линии i . Зависимость интенсивностей линий от электрического поля показана на рис. 10, б.

Список литературы

1. Левиин Л. В., Салецкий А. М. Лазеры на основе сложных органических соединений. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1992. 330 с.
2. Лазеры на красителях / Под ред. Ф. П. Шефера. М.: Мир, 1976. 302 с.
3. Рябов С. Г., Торопкин Г. Н., Усольцев И. Ф. Приборы квантовой электроники. М.: Радио и связь, 1985. 280 с.
4. Князев Б. А., Лебедев С. В., Мельников П. И. Лазерное возбуждение литиевого

пучка – расширение возможностей диагностики // Диагностика плазмы. М.: Энергоатомиздат, 1989. Вып. 6. С. 58–61.

5. Князев Б. А., Лебедев С. В., Мельников П. И. Активная штарковская спектроскопия атомного пучка как метод измерения электрических полей // Журнал технической физики. 1991. Т. 61, вып. 3. С. 6–18.

6. Knyazev B. A., An W., Bluhm H. et al. A laser-driven atomic-probe-beam diagnostic for the KALIF ion beam accelerator // Bull. Am. Phys. Soc. 1999. Vol. 44: PPD APS Annual Meeting. Seattle, November. 1999.

7. Knyazev B. A., Greenly J. B., Hammer D. A. Laser-driven atomic-probe-beam diagnostics // Review of Scientific Instruments. 2000. Vol. 71. No. 12. P. 4409–4414.

8. Bluhm H., Kessler G., Peterson R. R. Light ion beam inertial confinement fusion: requirements and achievements // Laser and Particle Beams. 1996. Vol. 50. No. 4. P. 655–663.

9. Крайнов В. П., Смирнов Б. М. Излучательные процессы в атомной физике. М.: Высш. образование, 1983. 288 с.

10. Князев Б. А., Лебедев С. В., Фокин Е. П. Мощный лазер на роданине 6Ж с повышенным ресурсом работы // Квантовая электроника. 1983. Т. 10, вып. 2. С. 276–282.

11. Knyazev B. A., An W., Bluhm H., Buth L. Atomic beam source for ion diode diagnostics // Proc. of 12th International Conference on High-Power Particle Beams. (Haifa, Israel). 1998. Vol. 1. P. 471–474.

12. Князев Б. А., Мельников П. И. Динамика спектров лазеров на кумарине 1 и оксазине 17 с ламповой накачкой // Журнал прикладной спектроскопии. 1993. Т. 58, вып. 3–4. С. 397–400.

13. An W., Knyazev B. A., Bluhm H. et al. Measurement of local electric field in high power ion diodes with resonantly excited probe beam atoms // Proc. 13th Internat. Conf. on High-Power Particle Beams. Nagaoka, Japan, 2000.

14. Бете Г., Солнтер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: ГИФМЛ, 1960. 562 с.

15. Sobelman I. I. Introduction to the theory of atomic spectra: 1st ed. Oxford: Pergamon Press, 1972.

А. М. Ражев, Д. С. Чуркин, Н. С. Тарасов

Институт лазерной физики СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 13/3, 630090, Новосибирск, Россия
E-mail: razhev@laser.nsc.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГЕНЕРАЦИИ ИНДУКЦИОННОГО ЛАЗЕРА НА МОЛЕКУЛЯРНОМ АЗОТЕ *

Впервые создан ультрафиолетовый импульсный индукционный лазер на молекулярном азоте с длиной волны 337,1 нм и импульсной мощностью 100 кВт. Описана система возбуждения импульсного индукционного разряда цилиндрической формы в азоте и создания инверсии населенностей на самоограниченных переходах молекул азота. Получена энергия генерации 1,2 мДж с длительностью импульсов 12 ± 1 нс. Лазерное излучение имело форму кольца с внешним диаметром 33 мм толщиной 1–1,5 мм. Расходимость излучения имела величину 0,3 мрад.

Ключевые слова: индукционный разряд, лазер, генерация, спектр излучения, азот.

В работе [1] впервые было предложено использование импульсного индукционного разряда для возбуждения индукционных газовых лазеров на электронных переходах атомов и молекул. В этой работе нами был описан первый импульсный индукционный лазер, который работал на переходах атомов фтора в области спектра 703–731 нм. Для формирования индукционного разряда в газовой смеси He-F_2 и получения генерации использовалась система возбуждения, собранная по схеме L–C инвертор и хорошо зарекомендовавшая себя при создании высокоэффективных УФ эксимерных лазеров [2]. В такой конструкции была получена энергия FI-лазера 0,12 мДж и импульсной мощностью 6 кВт.

Целью данной работы было исследование возможности формирования импульсного индукционного разряда в азоте и создания инверсии населенностей на электронных переходах $C^3P_u - B^3P_g$ молекул азота для достижения генерации на длине волны 337,1 нм. Под индукционным разрядом в данном случае понимается индукционно связанная плазма, созданная вихревыми электрическими токами в результате электромагнитной индукции, полученной переменным электромагнитным полем в газовой среде. В данном

случае подразумевается импульсный цилиндрический разряд в газе. Преимущества такого индукционного разряда заключаются в том, что он возникает без использования каких-либо электродов в газе и не является составной частью системы возбуждения в отличие от обычных электрических продольных и поперечных разрядов, которые являются последовательно включенными в электрическую схему элементами и неотъемлемо связанными с ней. Также изучение индукционного лазера на молекулярном азоте важно для понимания физики и возможностей возбуждения газов с помощью индукционного разряда.

Интерес к азотному лазеру на длине волны 337,1 нм вызван тем, что он является одним из наиболее популярных источников мощного УФ излучения и имеет много различных применений для накачки лазеров на красителях, полупроводниковых лазеров [3] в спектроскопии, диагностике, фотохимии, медицине и ряде других областей. Для возбуждения азотного лазера используется либо продольный электрический разряд, при этом энергия излучения не превышает 0,1–0,2 мДж, либо поперечный электрический разряд. В последнем случае энергия генерации может достигать величины, близкой

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 06-02-16149-а).

к 10 мДж. Традиционно используемые электрические разряды формируются в соответствии с обязательными требованиями, к которым относятся параметры E/P , плотность мощности возбуждения, обеспечивающими не только однородность объемного разряда, но и требуемый механизм образования инверсии населенностей и коэффициент усиления для достижения режима генерации. Такие разряды характеризуются распылением материала электродов, приводящим к загрязнению активной среды, возникновением катодных пятен, формированием стримеров, которые нарушают однородность и стабильность лазерного излучения. В результате наблюдается снижение ресурса работы лазеров, требующее замены не только рабочего газа, но и электродов, оптических элементов резонатора лазера.

Индукционный разряд не содержит каких-либо электродов, а следовательно, свободен от вышеперечисленных проблем, ограничивающих применение лазера. Кроме того, как показали эксперименты, индукционный разряд характеризуется высокими однородностью и воспроизводимостью, что при стабильно работающей системе возбуждения обеспечивает высокую стабильность лазерного излучения. Также преимуществом индукционного разряда является возможность создания газовых лазеров для высокотемпературных активных сред.

Исследованиям и созданию азотных лазеров посвящено большое количество работ [4]. В них описаны различные конструкции разрядных камер, в которых возбуждение молекул азота осуществлялось как продольным, так и поперечным разрядами с использованием разнообразных систем возбуждения. Механизм образования инверсии на рабочих переходах изучен достаточно хорошо и детально описан в [5]. Основным каналом заселения верхнего лазерного уровня C^3P_u является возбуждение прямым электронным ударом из основного состояния $X\Sigma$. Радиационное время жизни уровня C^3P_u составляет 40 нс, тогда как нижний лазерный уровень B^3P_g имеет большое время жизни ($\tau_b = 9$ мкс) [6], поэтому инверсия на этих переходах может существовать лишь первые несколько наносекунд. В результате лазер имеет высокий порог возбуждения около 200 В/см тор [7] и низкий полный КПД 0,01–0,1 %. Поэтому при создании азотных

лазеров необходимо иметь параметры плазмы, в которой электроны при концентрации 10^{14} – 10^{15} см⁻³ должны иметь энергию 12–16 эВ, а оптимальной является область энергий 14–16 эВ [8]. Таких параметров плазмы в обычном разряде можно достичь только с использованием систем возбуждения с предельно минимальной индуктивностью разрядного контура, обеспечивающей максимальные значения напряженности электрического поля в разрядном промежутке.

Описанные в литературе азотные лазеры возбуждались продольным или поперечным разрядами в широком диапазоне давлений азота и его смесей от единиц тор до нескольких атмосфер. В таких схемах возбуждения активная среда (газовая смесь, находящаяся между двумя электродами) является одним из элементов последовательной цепи, включающей в себя накопительную емкость и подводящие шины. Однородность разряда и электронные параметры плазмы находятся в прямой зависимости от параметров этой цепи, а именно от величины и индуктивности накопительной емкости, индуктивности и сопротивления подводящих шин, геометрии разрядного промежутка, давления и состава газовой смеси. Разряд формируется в электрическом поле между электродами и развивается в объеме и во времени, находясь в зависимости от перечисленных параметров всей цепи.

Исследования по созданию индукционного азотного лазера были начаты с использованием установки, описанной в [1]. Эксперименты по возбуждению азота индукционным разрядом показали неэффективность схемы возбуждения «L–C инвертор». Разряд в азоте получался при низких давлениях около 1 тор и интенсивность его была низкой, что указывало на недостаточную энергию, вложенную в индукционный разряд. В данной работе была разработана новая система формирования импульсного индукционного разряда в газах, электрическая схема которой показана на рис. 1. Эта схема включала в себя емкость C_1 , в которой запасалась энергия до 30 Дж при зарядных напряжениях до 25 кВ. Посредством высоковольтного коммутатора SG_1 энергия из емкости C_1 через дроссель L_1 передавалась в емкость C_2 , соединенную с индуктором (соленоидом) L_2 , находящимся на разрядной трубке, содержащей газ в качестве активной среды. Второй конец ин-

дуктора соединялся со вторым высоковольтным коммутатором SG_2 , который работал в неуправляемом режиме. Таким образом, создавался разрядный контур $C_2-L_2-SG_2$, который обеспечивал эффективную передачу энергии из индуктора в газовую среду в виде переменного магнитного поля. В результате возникновения движения зарядов индуцировались циркулярные электрические токи, которые формировали индукционный разряд в газе. В данном случае индукционный разряд имел форму цилиндра вблизи внутренней поверхности разрядной трубки. Одной из основных задач в проводимых исследованиях было нахождение оптимального сочетания таких параметров, как внутренний диаметр разрядной трубки и характеристики индуктора (соленоида), к которым относятся длина индуктора, число секций в нем, количество витков в каждой секции, сечение провода.

Индуктор L_2 представлял собой соленоид длиной 20–60 см, состоящий из набора отдельных соленоидов, выполненных в виде секций, соединенных параллельно и расположенных вдоль стеклянной трубки. Каждая из секций имела количество витков от 5 до 20, намотанных изолированным многожильным проводом сечением от 1,5 до 4,0 мм². Величина зарядной индуктивности L_1 была равна 150 мкГн и обеспечивала перезарядку емкости C_1 на емкость C_2 за время 1–2 мкс, а во время работы разрядного контура препятствовала процессу обратной перезарядки.

На рис. 2. показаны осциллограммы напряжения на соленоиде L_1 и лазерного излучения (а), а также их более детальный вид (б). Считается, что энергия из C_2 вкладывается в активную газовую среду посредством переменного магнитного поля в момент пробоя неуправляемого разрядника SG_2 . Осцилляции напряжения на индукторе наблюдались в течение 2–3 периодов при оптимальном давлении 0,2–0,5 тор, соответствующем возникновению генерации. Период колебаний напряжения на индукторе был равен 300 ± 20 нс и определялся величиной емкости C_2 и индуктивностью разрядного контура. Импульс излучения появляется через 150 нс после пробоя разрядника SG_2 , и его длительность на полувысоте оставляет 12 ± 1 нс (рис. 2, б). Такое поведение излучения индукционного азотного лазера значительно отличается от поведения лазера при

накачке стандартным разрядом и требует дальнейшего изучения.

Генерация на электронных переходах молекулярного азота была получена при возбуждении чистого азота при давлениях от 0,1 до 1,5 тор. Максимальная энергия излучения достигалась при давлении 0,4–0,7 тор и составила 1,2 мДж в трубке с внутренним диаметром 33 мм. Длина индуктора и, следовательно, активной среды была 600 мм. Оптический резонатор был образован задним плоским диэлектрическим зеркалом с коэффициентом отражения 99 % и передним выходным плоским диэлектрическим зеркалом с коэффициентом отражения около 50 %. Разрядная трубка герметизировалась двумя кварцевыми плоскопараллельными пластинами, которые были установлены перпендикулярно к оптической оси. Азот прокачивался вдоль разрядной трубки с небольшой скоростью – менее 0,1 л/мин. Генерация была получена и в отсутствие выходного зеркала, однако энергия генерации в этом случае была значительно ниже. Лазерное излучение имело форму кольца с внешним диаметром 33 мм толщиной 1–1,5 мм.

Спектры спонтанного излучения и генерации индукционного азотного лазера показаны на рис. 3. Спектры регистрировались в диапазоне от 250 до 800 нм. Излучение присутствовало только в диапазоне 280–420 нм и соответствовало второй положительной системе полос перехода $C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$. Наибольшая интенсивность была зарегистрирована в полосах (1,0) – 310,5 нм, (0,0) – 337,1 нм, (0,1) – 357,7 нм и (0,2) – 380,4 нм (рис. 3, а). Максимальную интенсивность имела полоса (0,0) с длиной волны в канте 337,1 нм. На этой длине волны была полу-

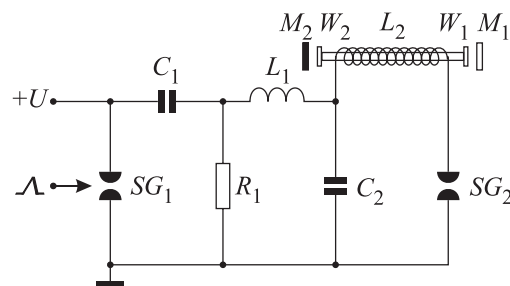


Рис. 1. Электрическая схема системы возбуждения индукционного лазера: U – 25 кВ; SG_1 – управляемый высоковольтный разрядник; SG_2 – неуправляемый высоковольтный разрядник; $C_1 = 100$ нФ; $C_2 = 18$ нФ; $L_1 = 150$ мкГн; $L_2 = 120$ нГн – индуктор; W_1, W_2 – окна; M_1, M_2 – зеркала резонатора

чена генерация, спектр которой представлял собой одну узкую линию (рис. 3, б). Спектрометр фирмы SOLAR, модель S-150, имел низкое спектральное разрешение 0,66 нм, поэтому детальные исследования структуры спектра генерации в этих экспериментах не проводились и являются предметом наших дальнейших исследований. Также была измерена расходимость лазерного излучения путем сравнения размеров пучка на выходе лазера и на расстоянии 10 м. Расходимость излучения составила 0,3 мрад.

В экспериментах отмечалась высокая однородность индукционного разряда. Это проявилось при изучении работы азотного лазера в импульсно-периодическом режиме. Частота следования импульсов в этих первых экспериментах изменялась в диапазоне от 1 до 25 Гц и была ограничена только возможностями источника питания лазера. Зависимость средней мощности генерации от частоты следования импульсов в этом диапазоне была линейной. В экспериментах отмечалась высокая воспроизводимость от импульса к импульсу амплитуды генерации, которая объяснялась нами как одно-

родностью и воспроизводимостью цилиндрического индукционного разряда, так и стабильностью работы электрической системы возбуждения. Этот факт был подтвержден одновременной регистрацией импульсов напряжения на индукторе и импульсов генерации при различных частотах следования импульсов. Поскольку активная среда непосредственно прилегает к внутренней поверхности разрядной трубки и имеет малую толщину – примерно 1,5 мм, то газ в зоне индукционного разряда эффективно охлаждается стенкой трубки. Это позволяет рассчитывать на увеличение средней мощности генерации индукционного азотного лазера до 200 мВт при увеличении частоты следования импульсов возбуждения до $\sim 10^2$ Гц.

В результате проведенных исследований была разработана и экспериментально изучена система формирования импульсного индукционного цилиндрического разряда в газах. Впервые исследованы спектральные и временные характеристики излучения импульсного индукционного разряда в азоте. Впервые получена генерация на электронных переходах молекулярного азота при

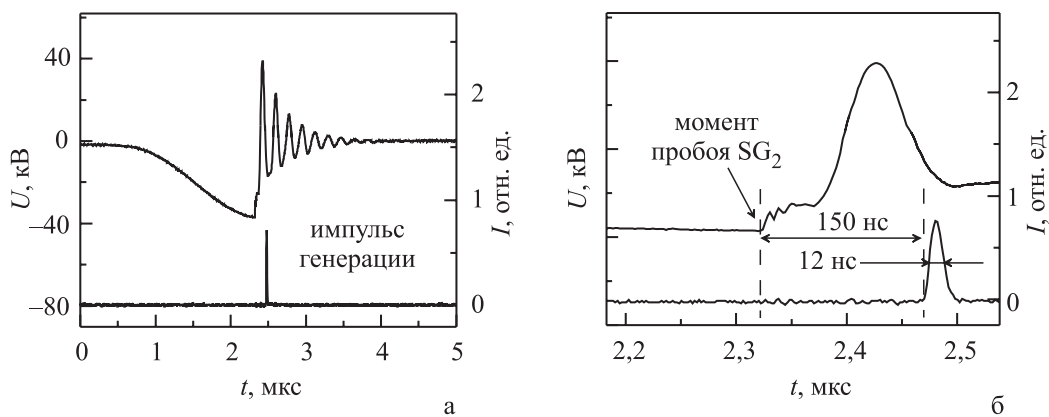


Рис. 2. Осциллограммы импульсов напряжения на соленоиде L_1 и лазерного излучения

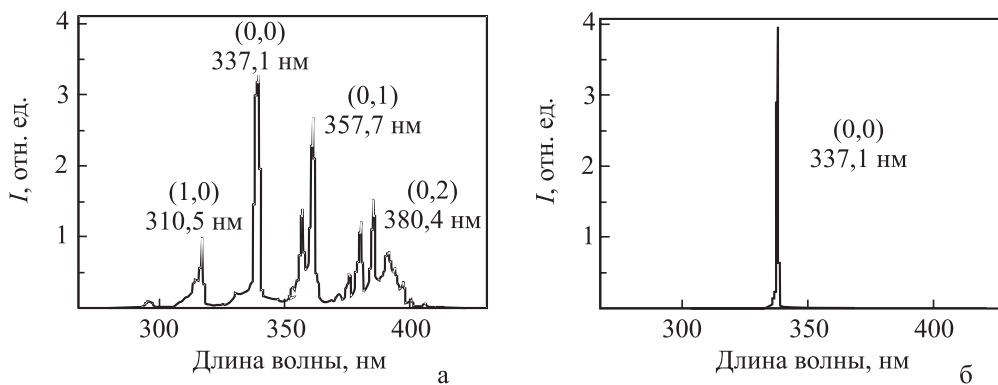


Рис. 3. Спектральные линии спонтанного (а) и лазерного (б) излучения азота

давлениях 0,1–1,5 тор. Максимальная энергия генерации достигалась при давлении 0,4–0,7 тор и была равна 1,2 мДж. Длительность импульсов излучения, измеренная на полувывсоте, составила 12 ± 1 нс. Таким образом, импульсная мощность генерации оказалась равной 100 кВт. В поперечном сечении световой пучок имел форму кольца с внешним диаметром 33 мм толщиной 1–1,5 мм. Расходимость излучения была 0,3 мрад.

Список литературы

1. Ражев А. М., Мхитарян В. М., Чуркин Д. С. FI-лазер в области 703–731 нм с возбуждением индукционным поперечным разрядом // Письма ЖЭТФ. 2005. Т. 82, вып. 5. С. 290–294.
2. Razhev A. M., Zhupikov A. A. Excimer ArF laser with an output energy of 1.3 J at 2.0 % efficiency on the He : Ar : F₂ mixture // Applied Physics. 2005. В 81. Р. 1113–1117.
3. Седова И. В., Сорокин С. В., Торопов А. А. и др. Лазерная генерация в гетероструктурах Cd(Zn)Se / ZnMgSSe при накачке

излучением азотного и InGaN / GaN лазеров // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38, вып. 9. С. 1135–1140.

4. Ражев А. М., Телегин Г. Г. Импульсные ультрафиолетовые лазеры на молекулярном азоте // Зарубежная радиоэлектроника. 1978. Т. 3. С. 76–94.
5. Gerry E. T. Pulsed-molecular-nitrogen laser theory // Applied Physics. 1965. Vol. 7. No. 1. P. 6–8.
6. Jeunehomme M., Duncan A. B. F. Lifetime measurements of some excited states of nitrogen, nitric oxide, and formaldehyde // J. Phys. C. 1964. Vol. 41. No. 6. P. 1692–1699.
7. Leonard D. A. Saturation of the molecular nitrogen second positive laser transition // Applied Physics. 1965. Vol. 7. No. 1. P. 4–6.
8. Cartwright D. C. Total cross sections for the excitation of the triplet states in molecular nitrogen // Phys. Rev. A. 1970. Vol. 2. No. 4. P. 1331–1348.

Материал поступил в редколлегию 02.05.2007

УДК 533.9.01, 533.9...12

И. А. Котельников¹, М. Роме², Р. Поццоли²

¹ Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: i.a.kotelnikov@inp.nsk.su

² Миланский университет
ул. Челория, 16, Милан, I-20133, Италия

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ В РАВНОВЕСИИ ЗАРЯЖЕННОЙ ПЛАЗМЫ

Показано, что релятивистские эффекты существенным образом изменяют равновесную конфигурацию заряженной плазмы, даже если линейная скорость вращения плазмы в скрещенных электрическом и магнитном полях мала по сравнению со скоростью света. Изменение особенно выражено в режиме быстрого вращения, когда частота азимутального вращения приближается к циклотронной частоте. При этом радиальный профиль плотности плазмы становится приблизительно параболическим в отличие от ступенчатого, который предсказывается нерелятивистской теорией. Отмечено, что указанные эффекты могут быть обнаружены в экспериментах, подобных эксперименту Тесса и др. [Phys. Rev. Lett. =135, 1436 (1975)]. Обсуждается также изменение бриллюэновского предела плотности плазмы в релятивистском случае.

Ключевые слова: заряженная плазма, равновесие, релятивистские эффекты.

Igor Kotelnikov
Novosibirsk State University
Pirogova Str. 2, Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: i.a.kotelnikov@inp.nsk.su

Massimiliano Romé, Roberto Pozzoli
I.N.F.N. Sezione di Milano and Università degli Studi di Milano
Via Celoria 16, Milano, I-20133, Italy

Relativistic Equilibrium of Nonneutral Plasmas

It is shown that relativistic effects strongly modify the equilibrium of nonneutral plasmas even if the linear velocity of plasma rotation in crossed electric and magnetic fields is small as compared to the speed of light. The change is especially pronounced for the fast rigid-rotor equilibrium, when the frequency of the azimuthal rotation is close to the cyclotron frequency, and the radial density profile becomes approximately parabolic rather than stepwise as predicted by the non-relativistic theory. It is argued that such effects could be detected in experiments similar to those performed by Theiss et al. [Phys. Rev. Lett. 135, 1436 (1975)]. The relativistic modification of the Brillouin density limit is also addressed.

Introduction

As is well known [1], within a non-relativistic cold fluid model the equilibrium of an infinitely long nonneutral plasma column with constant density, confined radially by a uniform magnetic field B_0 is characterized by the azimuthal rotation frequencies

$$\omega = \omega^{\pm} = -\frac{1}{2}\Omega \left[1 \pm \left(1 - 2\omega_p^2/\Omega^2 \right)^{1/2} \right], \quad (1)$$

where $\omega_p = (4\pi e^2 n/m)^{1/2}$ is the plasma frequency, with n , e and m the particle density,

charge and mass, respectively, and $\Omega = eB_0/mc$ is the non-relativistic cyclotron frequency (Ω is assumed to have the same sign of the charge). The two angular frequencies ω^- and ω^+ correspond to a slow and a fast rotation of the plasma column, respectively. As $\omega^{\pm}$ are independent of the radial coordinate r , the azimuthal motion of the plasma column corresponds to a rigid rotation about the axis of symmetry.

For a low density plasma, $2\omega_p^2/\Omega^2 \ll 1$, the frequency of slow rotation is approximately equal to the electric drift (diocotron) frequency,

$\omega^- \approx -\omega_p^2/2\Omega$, while the frequency of fast rotation approaches the cyclotron frequency, $\omega^+ \approx -(\Omega - \omega_p^2/2\Omega)$. For $2\omega_p^2/\Omega^2 = 1$, the two rotational equilibria merge, and $\omega^+ = \omega^- = -\Omega/2$. The condition $2\omega_p^2/\Omega^2 = 1$ is usually referred to as the Brillouin density limit: radially confined equilibria do not exist for $n > n_{B0} \equiv B_0^2/(8\pi mc^2)$ [1, 2]. The two rotational equilibria have been measured experimentally [3].

It is usually assumed that the electric current due to the azimuthal rotation of the nonneutral plasma column produces a negligible change of the axial magnetic field. A simple estimate readily shows that for the slow rotation equilibrium the relative depression of the magnetic field can be neglected,

$$\frac{\delta B}{B} \approx \left(\frac{\omega_p^2}{2\Omega} \right)^2 \frac{r^2}{c^2} \ll 1, \quad (2)$$

as long as the plasma radius is much smaller than the maximum radius of a rigidly rotating body allowed by the theory of relativity, $r \ll c/|\omega^-|$ [4]. The inequality (2) means that relativistic effects are unessential for the slow rotation mode. The diamagnetic correction of the magnetic field in cold nonneutral plasma is smaller than the relativistic correction (2) by the square of the ratio r_p/λ_D of the plasma radius r_p to the Debye length $\lambda_D = (T/4\pi e^2 n)^{1/2}$. It is shown below, however, that this may be not true for the fast rotation equilibrium.

Besides the variation of the magnetic field by plasma currents, another effect that must be taken into account is the relativistic modification of the centrifugal force. In the slow rotating equilibrium, the centrifugal force plays no significant role being much smaller than both Lorentz's and electric forces. On the contrary, in the fast rotating equilibrium it is almost equal to the Lorentz force while the electric force is small, being of the order of the relativistic corrections in the limit $n \ll n_{B0}$.

Cold relativistic equilibrium

For cold plasma, the relativistic macroscopic fluid radial force balance equation is written as

$$-\gamma \frac{mv_\theta^2}{r} = eE_r + \frac{e}{c} v_\theta B \quad (3)$$

where $\gamma = (1 - v_\theta^2/c^2)^{-1/2}$ is the relativistic factor, and

$$r \frac{d}{dr} (rE_r) = 4\pi en, \quad (4)$$

$$\frac{dB}{dr} = -\frac{4\pi}{c} env_\theta. \quad (5)$$

Integrating the preceding equations with $v_\theta = r\omega$, one obtains¹

$$\gamma \omega^2 r + \frac{1}{r} \int_0^r \omega_p^2 x dx + \Omega \omega r - \frac{\omega r}{c^2} \int_0^r \omega_p^2 \omega x dx = 0. \quad (6)$$

This equation can be solved with respect to ω for a given radial density distribution, or vice versa a solution for the function $\omega_p^2(r)$ can be sought for for a given radial profile of the rotation frequency, $\omega(r)$. The case of rigid rotation, $\omega(r) = \text{const}$, is of special interest as it characterizes a state of global thermal equilibrium, considered in Refs. 5, 6 for the non-relativistic case. The relativistic cold global equilibrium is analyzed in the next Section.

Rigid rotor equilibrium

When ω is independent of r , Eq. (6) reads

$$2v\rho^2 + \frac{2v^2\rho^2}{\sqrt{1-\rho^2}} + (1-\rho^2) \int_0^\rho xN(x) dx = 0, \quad (7)$$

where $\rho \equiv r|\omega|/c$, $v \equiv \omega/\Omega$, and $N \equiv 2\omega_p^2/\Omega^2 = n/n_{B0}$. Dividing Eq. (7) by $(1-\rho^2)$ and differentiating with respect to ρ gives

$$N(\rho) = -\frac{4v}{(1-\rho^2)^2} - \frac{2v^2(2+\rho^2)}{(1-\rho^2)^{5/2}}. \quad (8)$$

Eq. (5) then yields

$$\frac{B}{B_0} = \frac{1}{1-\rho^2} + \frac{v\rho^2}{(1-\rho^2)^{3/2}}. \quad (9)$$

The non-relativistic limit is obtained by simply putting $\rho=0$ everywhere in Eqs. (8) and (9). Figs. 1 and 2 show radial profiles of the density, Eq. (8), and the axial magnetic field,

¹ Eq. (6) differs from Eq.(5.19) in Ref. 1 by the definition of Ω through the magnetic field on the axis, rather than through the externally imposed magnetic field. This simplifies formulas (8) and (9) in comparison to their counterparts (5.22) and (5.23) in Ref. 1.

Eq. (9), respectively, for different values of the normalized rotation frequency v .

Physically acceptable solutions correspond to $-1 < v < 0$, since otherwise $N(\rho)$ becomes negative everywhere. The actual density profile is given by Eq. (8) for $0 < \rho < \rho_p < \rho_0$, where ρ_p represents the (normalized) value of the plasma radius r_p , and ρ_0 denotes the limiting radius where $N(\rho) = 0$. The latter can be given explicitly as

$$\rho_0 = \left[\frac{2(1-v^2)}{(1+3v^2)^{1/2} + 1 + v^2} \right]^{1/2}. \quad (10)$$

For $v \rightarrow -1$, the density profile becomes parabolic,

$$N(\rho) \approx 4(v+1) - 4\rho^2, \quad (11)$$

and Eq. (10) gives $\rho_0 \approx \sqrt{1+v} \rightarrow 0$. In dimensional units the limiting radius of the rigid-rotor equilibrium,

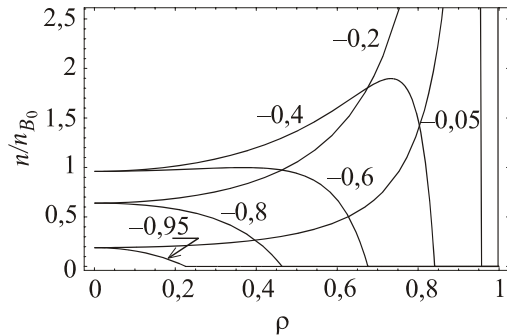


Fig. 1. (Color online) Nonneutral plasma density, normalized over the Brillouin density value n_{B0} evaluated with the magnetic field on the axis, vs. the normalized radius ρ for various values of the normalized rotation frequency v , indicated on the plot

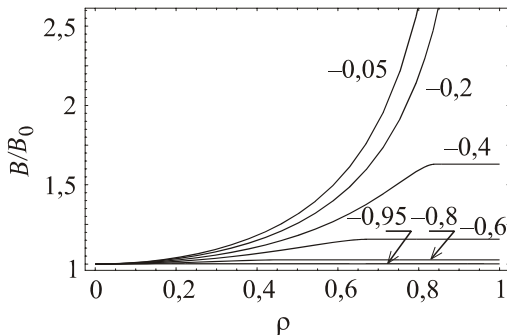


Fig. 2. (Color online) Axial magnetic field vs. ρ for different rotation frequencies v , indicated on the plot. For $\rho > \rho_0(v)$, B corresponds to the externally applied uniform magnetic field

$$r_0 \approx \frac{c}{|\Omega|} \left(1 + \frac{\omega}{\Omega} \right)^{1/2} \approx \frac{c \omega_{p0}}{\sqrt{2} \Omega^2}, \quad (12)$$

shrinks to zero for $n \ll n_{B0}$, being proportional to the plasma frequency ω_{p0} evaluated with the density at $\rho = 0$. Under these conditions the relativistic correction of the centrifugal force is greater by a factor n_{B0}/n than the axial magnetic field variation due to the azimuthal plasma current.

The entire parabolic profile (11) of the fast rotational equilibrium can be observed experimentally, when the radius r_p of the trapped nonneutral plasma approaches the limiting value r_0 . This condition can be easily achieved with a suitable choice of the parameters as will be shown in the concluding section.

For $v \rightarrow 0^-$, $\rho_0 \approx 1 - 9v^2/8$. Hence, in the slow rotational equilibrium the limiting radius is quite large if $n \ll n_{B0}$, being limited only by the maximum radius of a rigidly rotating frame that can be made up by real bodies,

$$r < r_0 \approx \frac{c}{|\omega|} \approx \frac{2c|\Omega|}{\omega_{p0}^2}. \quad (13)$$

However, the equilibrium density profiles are not stepwise as predicted by classical theory, being peaked near the limiting radius as shown in Fig. 1.

The density profile (8) assumes its maximum value at

$$\rho_{max} = \begin{cases} 0 \\ \left[\frac{4(4-9v^2)}{2(16+45v^2)^{1/2} + 8 + 9v^2} \right]^{1/2} \end{cases} \quad \begin{aligned} -1 < v \leq -2/3, \\ -2/3 \leq v < 0, \end{aligned} \quad (14)$$

i.e., the plasma density monotonically decreases with the radius for $-1 < v < -2/3$, while hollow density profiles are found for $-2/3 < v < 0$. Both monotonic and hollow density profiles shown in Fig. 1 are stable since they correspond to global equilibrium states (at $T = 0$), which are not destroyed by like-particle collisions [5].

Brillouin density limit

By definition, the Brillouin limit represents the maximum density, n_{max} , that can be achieved within the allowed range of rigid-rotor frequen-

cies. In the non-relativistic case, the limit is given by $n_{\max} = n_{B0}$. However Fig. 1 clearly shows that $n_{\max}/n_{B0}$ can be greater than 1. This is especially evident for $v \rightarrow 0^-$ when the magnetic field shielding becomes very strong, as shown in Fig. 1.

On the other hand, the plasma density remains always smaller than the local Brillouin's density limit, i.e., $n(\rho) \leq n_B = n_{B0} \times [B(\rho)/B_0]^2$, as shown in Fig. 3. For a given frequency of rotation the ratio n/n_B is maximal at $\rho=0$ if $-1 < v < -1/2$, and at bigger radii if $-1/2 < v < 0$. The absolute maximum of n/n_B is reached for $v = -1/2$ and $\rho = 0$, and it is equal to 1.

Thus, the inequality

$$n \leq n_B \quad (15)$$

holds locally for every radius and every rotation frequency (see Fig. 4), and can therefore be thought of as a relativistic generalization of the Brillouin density limit for rigidly rotating nonneutral plasmas. Differential rotation generally makes it possible for the plasma density to exceed the Brillouin limit as will be shown in the next section.

Differential rotation

For a non-uniform rotation frequency, it is useful to introduce a different normalization of the lengths; therefore in this section the normalized radius is defined as $\rho \equiv r|\Omega|/c$. Eq. (6) then takes the form

$$\begin{aligned} & \frac{\rho v^2}{\sqrt{1-\rho^2 v^2}} + \rho v - \frac{\rho v}{2} \int_0^\rho x N(x) v(x) dx + \\ & + \frac{1}{2\rho} \int_0^\rho x N(x) dx = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

For an arbitrary $N(\rho)$ the integral equilibrium equation (16) allows one to determine $v(\rho)$. Alternatively, one can seek $N(\rho)$ for a given $v(\rho)$. Since Eq. (16) is linear with respect to $N(\rho)$, the latter approach is usually more effective.

Some general properties of the solutions can be deduced by using power series for v and N . If $N(r=0) \neq 0$, it results from (16) that both v and N can be expanded in even powers of ρ (with one notable exception, see below). Substituting $v(\rho) = \sum_{k=0}^{+\infty} v_k \rho^{2k}$ and

$N(\rho) = \sum_{k=0}^{+\infty} N_k \rho^{2k}$ into Eq. (16) and gathering the terms with the same power of ρ yields a chain of equations that allow to express N_k recursively through N_{k-1} . At lowest order, this procedure leads to the relation

$$N_0 = -4v_0(1+v_0), \quad (17)$$

that yields two frequencies, $v_0^\pm$, for a given density N_0 in agreement with the existence of two equilibria with slow and fast rotation. These two frequencies are the same as the non-relativistic solutions in Eq. (1) (when expressed in dimensional units).

Applying this procedure to the case of uniform density, $N(\rho) = N_0$, one easily obtains an approximate expression

$$v^\pm(\rho) = v_0^\pm - \frac{(v_0^\pm)^3(3v_0^\pm + 2)}{2(2v_0^\pm + 1)} \rho^2 + O(\rho^4) \quad (18)$$

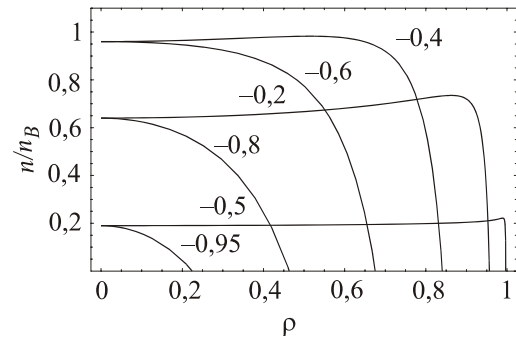


Fig. 3. (Color online) Nonneutral plasma density, normalized over $n_B = B^2/8\pi mc^2$, vs. the normalized radius ρ , for various values of the normalized rotation frequency v , indicated on the plot

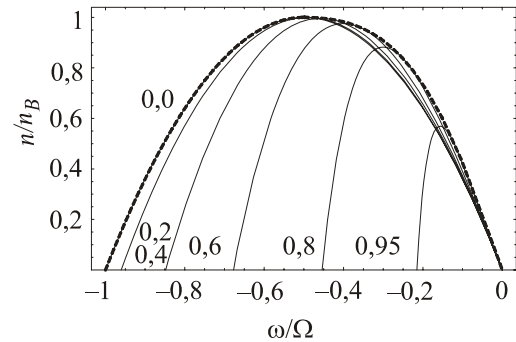


Fig. 4. (Color online) Nonneutral plasma density, normalized over the local Brillouin density limit $n_B = B^2/8\pi mc^2$, for different radii $r/|\omega|/c$, indicated on the plot (solid curves), and the maximum of n/n_B (dashed envelope) vs. the rotation frequency

for $v(\rho)$ which is valid for small ρ provided that $v_0^\pm$ is not too close to $-1/2$, i.e. $N_0 \neq 1$.

For $N_0 \rightarrow 1$, the expansion in even powers of ρ is no longer valid, and a more accurate estimate gives

$$v^\pm(\rho) = -\frac{1}{2} \mp \left[\left(\frac{1}{2} + v_0^\pm \right)^2 + \frac{1}{32} \rho^2 \right]^{1/2}. \quad (19)$$

From a practical point of view it is more convenient to deal with a differential equation rather than the original integral equation (16). Namely, a differential equation of the form

$$N' + \tilde{\alpha} N + \tilde{\beta} = 0, \quad (20)$$

can be derived by suitably differentiating Eq. (16) twice, where the prime stands for the derivative with respect to ρ , and $\tilde{\alpha}$ and $\tilde{\beta}$ are functions of ρ , v , v' and v'' . Alternatively, one can obtain an equation of the form

$$v' + \tilde{\gamma} = 0, \quad (21)$$

with $\tilde{\gamma}$ being a function of ρ , v , N and $\int_0^\rho x N(x) dx$. Both (20) and (21) are first order ordinary differential equations (with respect to

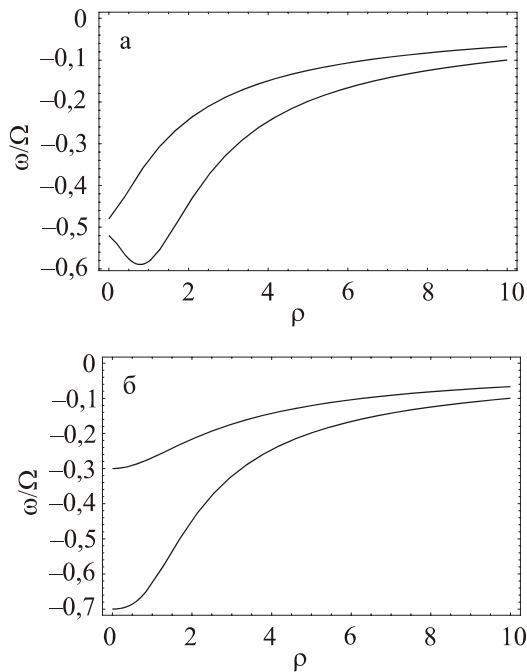


Fig. 5. (Color online) Frequency vs. radius for the case of uniform density: (a)— $\omega_0^\pm/\Omega = -(0.5 \pm 0.02)$, the plasma density at the axis is close to Brillouin's limit, $n(0)/n_{B0} = 0.998$; (b)— $\omega_0^\pm/\Omega = -(0.5 \pm 0.2)$, $n(0)/n_{B0} = 0.84$

the functions $N(\rho)$ and $v(\rho)$, respectively), which can be solved, in general numerically, by standard methods. Eqs. (20) and (21) have a wider class of solutions than the original integral equation (16). For example, Eq. (20) generally admits a solution for any boundary condition $N(0) = N_0$, but only the solutions satisfying the relation (17) between $N_0 = N(0)$ and $v_0 = v(0)$ are acceptable, since they also obey the original integral equation (16). Similar considerations lead to the conclusion that for any given density profile two rotational modes exist according to two solutions $v_0^\pm$ of Eq. (16).

The two rotational modes found numerically for the case of uniform density are shown in Fig. 5 for two different values of N_0 .

For the fast rotational equilibrium, it can be deduced from Eq. (18) that the frequency profiles are non-monotonic (as in Fig. 5 on the left) for $-2/3 < v < -1/2$. Based on the non-relativistic theory, these equilibria are expected to be unstable, since the derivative $d^2(\rho^2 v)/d(\rho^2)^2$ changes sign, while only monotonic profiles are proven to be certainly stable [7,8]. To the best of the author's knowledge, a consistent theory of the stability of nonneutral plasma equilibria with relativistic effects included is not available so far (except for the slow rotational mode—see [9]), so this problem deserves further analysis.

The example of uniform density explicitly demonstrates that the plasma may in principle be unbounded since the limiting radius turns out to be infinite. For any value of N_0 , the asymptotic behavior of the rotation frequency for $\rho \rightarrow +\infty$ is given by

$$v^+ \simeq -\frac{1}{\rho}, \quad v^- \simeq -\frac{1}{\sqrt{2}\rho}.$$

Radially bounded solutions are not an exclusive feature of rigidly rotating plasmas. The following completely analytical solution illustrates this fact, although it is singular at the limiting radius $r_0 = 4c/|\Omega|$:

$$v(\rho) = -\frac{1}{2} \frac{1}{1 + (\rho/4)^2}, \quad (22)$$

$$N(\rho) = \frac{1 + (\rho/4)^2}{[1 - (\rho/4)^2]^3}. \quad (23)$$

Despite the singularity, the modified Brillouin limit (15) holds in the entire range $r < r_0$.

Another peculiar solution

$$v(\rho) = -\frac{a}{\rho} \frac{1}{\sqrt{1+a^2}}, \quad (24)$$

$$N(\rho) = 2\sqrt{1+a^2} (\rho/a)^{a^2-1} H(\rho-a) \quad (25)$$

gives an example of annular vortex with internal radius $a > 0$ (H denotes Heaviside's step function). This fast rotational equilibrium is characterized by $B/B_0 = (\rho/a)^{a^2}$ and constant relativistic factor $\gamma = \sqrt{1+a^2}$. For the particular case $a=1$ the solution describes an annular vortex with uniform density

$$v(\rho) = -1/\sqrt{2}\rho, \quad N(\rho) = 2\sqrt{2}H(\rho-1). \quad (26)$$

This fast rotational equilibrium shows also that in the case of differential rotation the plasma density can exceed the Brillouin limit found for the case of rigid rotation, see inequality (15).

Discussion

It has been shown that the relativistic change of the centrifugal force and the shielding of the magnetic field by the azimuthal current due to the rotating charged column strongly modify the equilibrium density profile of a nonneutral plasma even if the linear velocity of the rotation is small as compared to the speed of light.

The modification becomes especially strong for the fast rigid rotor plasma equilibrium, when the azimuthal rotation frequency approaches the cyclotron frequency. In this case, the radial extent of the plasma column, allowed by the relativistic effects, turns out to be much smaller than the limiting radius, $c/|\omega|$, of a rigidly rotating frame that can be realized by real bodies. In addition, for the experimentally relevant case in which the limiting radius becomes comparable with the plasma radius r_p , the density profile becomes nearly parabolic rather than stepwise as predicted by the non-relativistic theory, see Eq. (11).

The relativistic modification of the equilibrium density profile should be observable in experiments similar to those performed by Theiss et al. [3] more than 30 years ago. Putting $n \approx 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ and $B \approx 150 \text{ gauss}$ ($2\omega_p^2/\Omega^2 \approx 0.035$) into Eq. (12) gives $r_0 \leq 1.0 \text{ cm}$. For these parameters, thermal ef-

fects are negligible for $T \leq 1 \text{ eV}$, since $r_0/\lambda_D \approx 10$. In the earlier experiments [3], the plasma radius was ten times smaller than the limiting radius, so the authors did not notice the modification of the density profile.

The radial extent of the nonneutral plasma column in the case of differential rotation may not be bounded in principle, as it has been demonstrated explicitly for the case of uniform plasma density. However, a non-uniformly rotating plasma column may not be stable in contrast to the case of rigid rotation. Moreover, like-particle collisions tend to eliminate radial gradients of the rotation frequency. It is therefore expected that transport processes or various instabilities lead to the formation of a rigidly rotating, radially bounded equilibrium.

Finally, it has been found that the Brillouin density limit should be modified if the shielding of the external magnetic field by the current associated with the plasma rotation is significant. The modified Brillouin limit has been casted into the form (15) that relates the density of rigidly rotating plasma at a given radius with the magnetic field value at the same radius.

In conclusion, it is worth noting that a correct self-consistent treatment of the plasma density profile close to the plasma edge requires taking into account finite temperature corrections in the force balance equation, and relativistic effects are expected to play a significant role modifying the solution that has been found earlier for the non-relativistic case [5]. The investigation of the relativistic warm plasma equilibrium is currently under way and will be reported elsewhere.

This work has been performed during a visit of I. K. to the Department of Physics of the University of Milano thanks to a fellowship supported by the Cariplo Foundation and the Landau Network—Centro Volta.

References

1. R.C. Davidson, *An Introduction to the Physics of Nonneutral Plasmas* (Addison-Wesley, Redwood City, 1990).
2. L. Brillouin, *Phys. Rev.* **167**, 260 (1945).
3. A.J. Theiss, R.A. Mahaffey and A.W. Trivelpiece, *Phys. Rev. Lett.* **135** 1436 (1975).
4. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *A Course in Theoretical Physics*; Vol. 2: Classical Theory of Fields (Pergamon Press, Oxford, 1971).
5. T.M. O'Neil and C.F. Driscoll, *Phys. Fluids* **122**, 266 (1979).

6. T.M. O'Neil, Comments Plasma Phys. Contr. Fusion **15**, 213 (1980).

7. A.V. Timofeev, *Resonant effects in oscillations of inhomogeneous continuum flows*, in Reviews of Plasma Physics, edited by B.B. Kadomtsev (Consultants Bureau, New York, 1992), Vol. 17, p. 193.

8. A.V. Timofeev, *Resonant Phenomena in Oscillations of Plasmas* (Fizmatlit, Moscow, 2000) (in Russian).

9. R.C. Davidson, K.T. Tsang and J.A. Swegle, Phys. Fluids **127**, 2332 (1984).

Материал поступил в редколлегию 21.08.2007

**А. В. Аржанников, В. Т. Астрелин, П. В. Калинин,
С. Л. Синицкий, В. Д. Степанов**

Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

Институт ядерной физики СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 11, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: A.V.Arzhannikov@inp.nsk.su; V.T.Astrelin@inp.nsk.su;
P.V.Kalinin@inp.nsk.su; sinitsky@inp.nsk.su; V.D.Stepanov@inp.nsk.su

ОДНОВРЕМЕННАЯ ГЕНЕРАЦИЯ И ТРАНСПОРТИРОВКА ДВУХ СИЛЬНОТОЧНЫХ ЛЕНТОЧНЫХ ПУЧКОВ

Приведены результаты исследований по одновременной генерации и транспортировке двух килоамперных ленточных пучков релятивистских электронов, которые предназначены для получения мощных импульсов электромагнитного излучения миллиметрового и субмиллиметрового диапазонов по схеме многоканального планарного мазера на свободных электронах с двумерной пространственно распределенной обратной связью. В компьютерном моделировании продемонстрирована возможность одновременной генерации нескольких ленточных пучков с приемлемыми параметрами для накачки синфазных колебаний миллиметрового излучения в соответствующем числе каналов такого мазера. В свою очередь, в экспериментах на установке ЭЛМИ осуществлена одновременная генерация двух ленточных микросекундных пучков в диоде с магнитной изоляцией при следующих параметрах: энергия электронов – 0,8 МэВ, ток каждого пучка до 3 кА, сечение одного пучка – $0,4 \times 7$ см. Обсуждена перспектива использования такой пары пучков для реализации двухстадийной схемы получения терагерцового излучения.

Ключевые слова: сильноточная электроника, электронные пучки.

Введение

Для получения мощных ($P \sim 1$ ГВт) импульсов пространственно когерентного миллиметрового излучения нами была предложена и развита концепция планарного мазера на свободных электронах (МСЭ) с двумерной пространственно распределенной обратной связью (РОС) [1–3]. Эта концепция призвана обеспечивать устойчивый фазовый синхронизм в потоке миллиметрового излучения, создаваемом пучком релятивистских электронов с поперечным размером, на несколько порядков величины превышающим длину волны генерируемого излучения. Указанный механизм обратной связи может быть реализован с помощью двумерных брэгговских резонаторов планарной или коаксиальной геометрии. Теоретический анализ показал, что для обеих конфигураций режим генерации пространственно когерентного излучения достигается даже в условиях указанной выше простран-

ственно развитой электродинамической системы [3]. Возможность эффективной работы такой двумерной РОС продемонстрирована недавно в экспериментах с планарным МСЭ на установке ЭЛМИ. В ходе этих экспериментов была осуществлена одномодовая генерация импульсов 4 мм излучения с мощностью ~ 10 МВт и длительностью до 0,4 мкс [4; 5]. В этих экспериментах использовался релятивистский электронный пучок (РЭП) со следующими параметрами: энергия электронов – 1 МэВ, плотность тока – 1 кА/см^2 , поперечное сечение – $0,4 \times 7$ см, длительность импульса – около 3 мкс [5]. (Подобный результат получен партнерами из Стратклайдского университета в Великобритании на пучке с аксиально-симметричным сечением и длительностью 200 нс [6].)

Учитывая тот факт, что в компьютерном моделировании нами была выявлена возможность одновременной генерации в одном ускорительном диоде нескольких ленточных пучков с указанными параметрами,

мы предложили вариант МСЭ с двумя ленточными пучками, в котором может реализоваться двухстадийная схема генерации микросекундных импульсов терагерцового излучения мегаваттного уровня мощности [7]. Физический механизм генерации терагерцового излучения в данном случае основан на эффекте вынужденного рассеяния электромагнитной волны накачки на пучке релятивистских электронов. В предлагаемой схеме исходная волна накачки на частоте 75 ГГц генерируется первым ленточным пучком в МСЭ с планарным резонатором, в котором для обеспечения пространственного синхронизма электромагнитных колебаний используется двумерный брэгговский отражатель. Это 75-гигагерцовое излучение через специальный волновод связи поступает в соседний с мазером щелевой канал, где распространяется навстречу второму ленточному пучку релятивистских электронов. Рассеянное на электронах пучка излучение, распространяющееся по направлению движения электронов, будет иметь частоту выше частоты исходной волны накачки в $4\gamma^2$ раз, что лежит в области частот в несколько терагерц для энергии электронов около 1 МэВ.

Реализация проекта генерации терагерцового излучения по описанной выше двухстадийной схеме требует, прежде всего, разработки ускорительного диода, который обеспечивал бы одновременное получение двух сильноточных ленточных пучков. Второй не менее важной задачей является осу-

ществление транспортировки интенсивных ленточных РЭП в умеренном по величине магнитном поле внутри щелевых каналов в условиях, близких к устойчивому равновесию. Результаты компьютерного моделирования и экспериментальных исследований, направленных на решение этих проблем составляют основное содержание данной работы.

Компьютерное моделирование

Главная проблема при получении сильноточных РЭП, приемлемых для воплощения в жизнь схемы двухстадийной генерации терагерцового излучения, состоит в необходимости достижения предельно высокой яркости этих пучков, которая пропорциональна отношению плотности тока пучка к квадрату его угловой расходимости – θ^2 . Расчеты показывают, что для получения приемлемого уровня перекачки энергии волн в терагерцовую область необходима плотность тока пучка масштаба 3 кА/см² при разбросе продольных скоростей электронов $\Delta V_{\parallel} / V_{\parallel} \approx \theta^2 / 2$ менее 10^{-2} [7]. Следует отметить, что для получения миллиметрового излучения требование на разброс по продольным скоростям электронов пучка существенно менее жесткое: $\leq 5 \cdot 10^{-2}$. В ходе аналитического рассмотрения и компьютерного моделирования, проведенного нами ранее в работе [8] для магнитно-изолированного ускорительного диода с ленточной геометрией при напряжении на диоде 1 МВ, плотности тока в пучке 150 А/см² и ведущем магнитном поле в канале 0,6 Тл, было показано, что правильным выбором геометрии проводящих границ катод-анодного промежутка, а также хода силовых линий магнитного поля и его величины в области движения электронов возможно подавление угловой расходимости электронного пучка до уровня $\theta \sim 2 \cdot 10^{-2}$, что обеспечивает выполнение условия $\Delta V_{\parallel} / V_{\parallel} \sim 2 \cdot 10^{-4}$. Более того, в компьютерном моделировании одновременной генерации 4-ленточных пучков в единой ускорительной системе удалось также продемонстрировать получение такой яркости пучков, которая адекватна их использованию для генерации миллиметрового излучения [9].

Что касается перспектив применения ленточных пучков в двухстадийной схеме генерации терагерцового излучения, то по результатам компьютерного моделирования

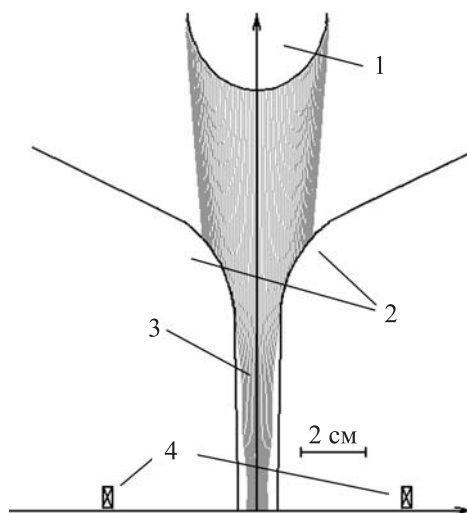


Рис. 1. Геометрия диода с магнитной изоляцией: 1 – катод; 2 – анод; 3 – электронный пучок; 4 – катушки соленоида на канале

одновременной генерации двух ленточных пучков в диоде с магнитной изоляцией и выводом этих пучков в узкие щелевые каналы нами показано, что угловая расходимость электронов может быть доведена до уровня $\theta \sim 5 \cdot 10^{-2}$ (что соответствует $\Delta V_{\parallel} / V_{\parallel} \sim 10^{-3}$) при значительно большей плотности тока пучка 1 кА/см^2 в магнитном поле $1,7 \text{ Тл}$. В качестве примера на рис. 1 представлены электронные траектории, полученные в ходе решения самосогласованной двумерной стационарной задачи о генерации ленточного пучка в диоде с помощью кода POISSON-2. По результатам моделирования была выбрана наиболее подходящая конструкция магнитно-изолированного диода, включая конфигурацию катушек магнитной системы ускорителя.

Не менее важной задачей моделирования явилась проводка ленточных пучков в щелевом канале. Теоретическое рассмотрение прохождения отдельного сильноточного ленточного РЭП в щелевом канале и соответствующие эксперименты были впервые проведены нами в 1989 г. [10; 11]. Нынешние исследования относятся к случаю двух пучков. При решении задачи предполагалось, что каждый ленточный пучок имеет однородную по сечению плотность тока, а масштаб длины, на котором происходит заметная перестройка сечения пучка за счет дрейфовых движений в собственных полях, существенно превышает зазор между стенками канала. Последнее условие эквивалентно малому влиянию собственных полей пучка на движение электронов по сравнению с действием ведущего магнитного поля. В расчетах также предполагалось, что канал имеет форму прямоугольного короба с идеально проводящими стенками, ось которого направлена вдоль вектора однородного внешнего магнитного поля. Для нахождения электрических и магнитных полей пучка решалось двумерное уравнение Пуассона методом разложения в ряды Фурье. При этом граница пучка была аппроксимирована произвольной замкнутой ломаной линией. Затем вместе с электронами, движущимися в полученных электрических и магнитных полях на границе пучка, производилось смещение границы пучка в поперечном сечении канала. На рис. 2 представлена эволюция сечения одного из двух стационарных ленточ-

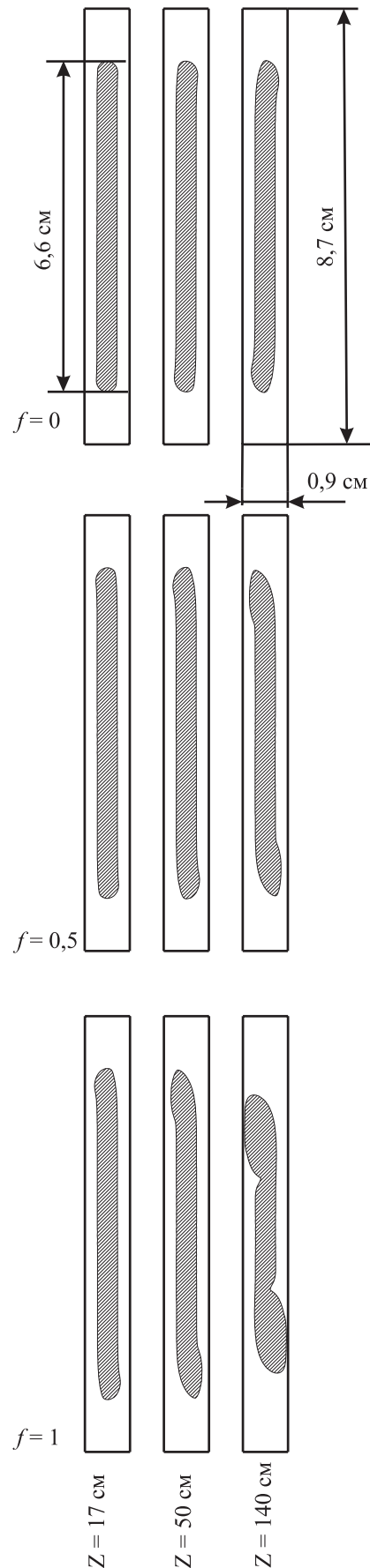


Рис. 2. Форма сечения пучка при движении его в канале на различных координатах Z для трех величин степени нейтрализации пучка по заряду

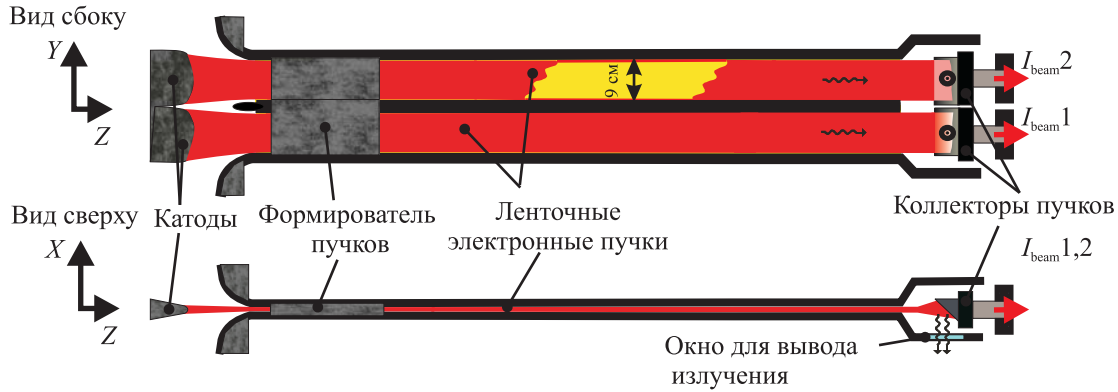


Рис. 3. Схема экспериментов по одновременной генерации двух ленточных пучков

ных пучков с энергией электронов 0,8 МэВ при токе каждого пучка 3 кА и первоначальном размере $0,4 \times 6,6$ см. Здесь представлено изменение сечения пучка по мере продвижения электронов в канале с проводящими стенками с сечением $0,9 \times 8,7$ см и длиной 140 см в условиях ведущего магнитного поля величиной 1,7 Тл. Результаты представлены для трех случаев, когда степень нейтрализации пучка по заряду ионами, которые могут появиться в объеме пучка за счет ионизации им остаточного газа, была равна 0; 0,5 и 1. Как видно из рисунка, существенное изменение формы сечения пучка в первом и втором случае наблюдается только при приближении к концу канала. Но при полной нейтрализации пучка по заряду изменения сечения пучка имеют место уже на расстоянии 50 см от места его входа в канал. Направления и величины смещений концов ленточного пучка в обоих случаях могут быть легко оценены с помощью известной зависимости скорости

поперечного смещения электрона (см., например, [10]):

$$\vec{V}_{\perp} = c \frac{\vec{E} \times \vec{H}_0}{H_0^2} + v_{\parallel} \frac{\vec{H}}{H_0} = c \frac{\vec{E} \times \vec{H}_0}{H_0^2} \left(\frac{1}{\gamma^2} - f \right), \quad (1)$$

где $\vec{E}$ и $\vec{H}$ – суммарные электрическое и магнитное поля, создаваемые зарядами и токами как электронов пучка, так и зарядами и токами в проводящих стенках канала, $\vec{H}_0$ – однородное внешнее магнитное поле, а f – степень нейтрализации пучка по заряду.

Для того чтобы форма сечения пучка не изменялась в процессе его движения по каналу (т. е. оставалась равновесной) даже в условиях ненулевой поперечной скорости электронов, необходимо, чтобы поперечное смещение электронов, составляющих границу пучка (смещение направлено вдоль эквипотенциалей), происходило именно вдоль границы. Отсюда следует, что граница пучка должна совпадать с эквипотенциалю. Теоретически задача о нахождении равновесной формы сечения была решена в работе [10], а экспериментально такое равновесие продемонстрировано в [11]. Установлено, что равновесное сечение реализуется при соотношении между толщиной пучка и зазором между стенками канала равном $\frac{3}{4}$. Но для воплощения двухстадийной схемы с ленточными пучками выполнить данное условие не представляется возможным. Для обеспечения условий эффективной генерации 4 мм излучения величина зазора в канале не должна превышать 2–3 длин волн, а величина поперечной скорости электронов должна быть равной $V_{\perp} \approx 0,2 c$, что дает величину поперечного ларморовского радиуса около 0,1 см. В то же время для

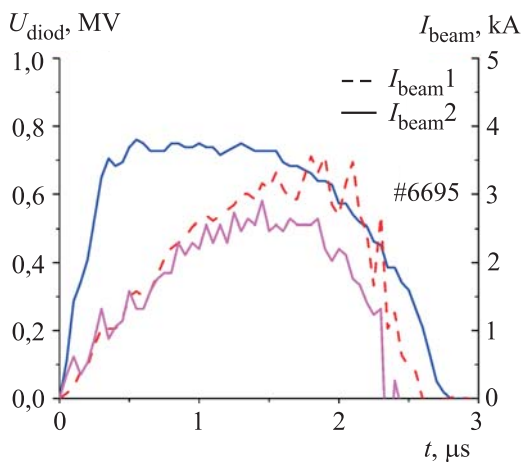


Рис. 4. Оциллограммы напряжения на диоде и двух пучковых токов на выходе из каналов

раскачки такой скорости электронов амплитуда ондуляторного поля должна быть на уровне $0,1 H_0$, что приводит к дополнительному колебанию границы пучка в канале на величину масштаба $0,1$ см. В итоге, граница сечения пучка должна отстоять от стенки канала минимум на $0,2$ см, что не позволяет в эксперименте выполнить равновесное соотношение. Таким образом, мы намеренно отходим от равновесной формы сечения пучка, предполагая, что в условиях нашего эксперимента деформация сечения пучка на длине резонатора будет допустимой.

Результаты экспериментов по генерации и транспортировке двух ленточных пучков

Исходя из результатов компьютерного моделирования, были поставлены эксперименты по одновременной генерации двух ленточных пучков и транспортировке их в вакуумных щелевых каналах. С этой целью нами использован опыт создания магнитно-изолированных ленточных диодов и моделирования в них процессов генерации пучков с помощью кодов для расчета электронной оптики.

Схема эксперимента представлена на рис. 3. Два ленточных пучка генерируются с помощью двух вытянутых в вертикальном направлении катодов, находящихся друг над другом (см. вид сбоку). Катоды изготовлены из волокнистого графитового материала для обеспечения однородной эмиссии по их поверхности. Магнитное поле при движении пучка от катода в транспортный канал адиабатически нарастает от значения $0,35$ до $1,7$ Тл, обеспечивая тем самым магнитную компрессию пучка с повышением плотности тока до $1\text{--}1,5$ кА/см². При этом в соответствии с расчетами питч-угол электронов по отношению к полному магнитному полю в канале не может превышать нескольких градусов. При прохождении пучками области сжатия их сечения магнитным полем на входе в канал транспортировки, внешние области сечения срезались специальным графитовым формирователем так, что только центральная часть сечения пучка с размерами $0,4 \times 7$ см, в которой электроны должны иметь наименьшие питч-углы, проходила в канал (см. рис. 3). Далее после транспортировки пучка в канале с магнитным полем $1,7$ Тл на расстояние 140 см пучки направля-

лись в спадающем магнитном поле на графитовые коллекторы. В эксперименте коллекторы находились в магнитном поле $0,15$ Тл, что на порядок величины снижало плотность тока пучка и этим обеспечивало исключение поверхностной эрозии и распыления материала коллекторов внутрь каналов. Толщина ленточного сечения пучков внутри каналов в этом эксперименте была выбрана равной $0,4$ см при зазоре между стенками каналов $0,9$ см для того, чтобы электроны пучка, которые в экспериментах по генерации миллиметрового излучения должны колебаться в поперечном направлении под действием магнитного поля ондулятора, не могли достигать стенок каналов. На рис. 4 приведены типич-

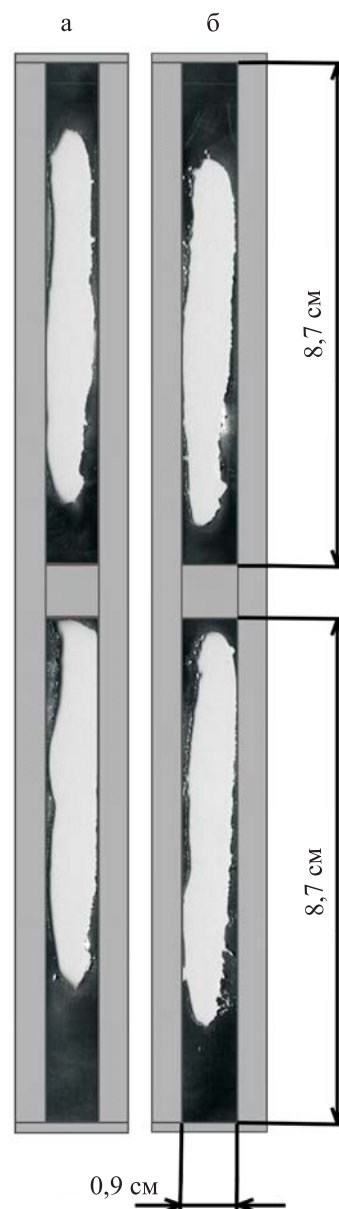


Рис. 5. Отпечатки ленточных пучков на Тi фольгах при $Z = 140$ см

ные осциллограммы напряжения на диоде и токов двух пучков, поглощенных коллекторами на выходе из каналов. Фольги были изолированы от коллекторов вакуумным зазором в 3 см. Легко видеть, что токи пучков одинаково быстро нарастают во времени благодаря движению плазмы в диоде и сокращению катод-анодного зазора, но по величине несколько отличаются. Для выяснения степени деформации сечений пучков и выявле-

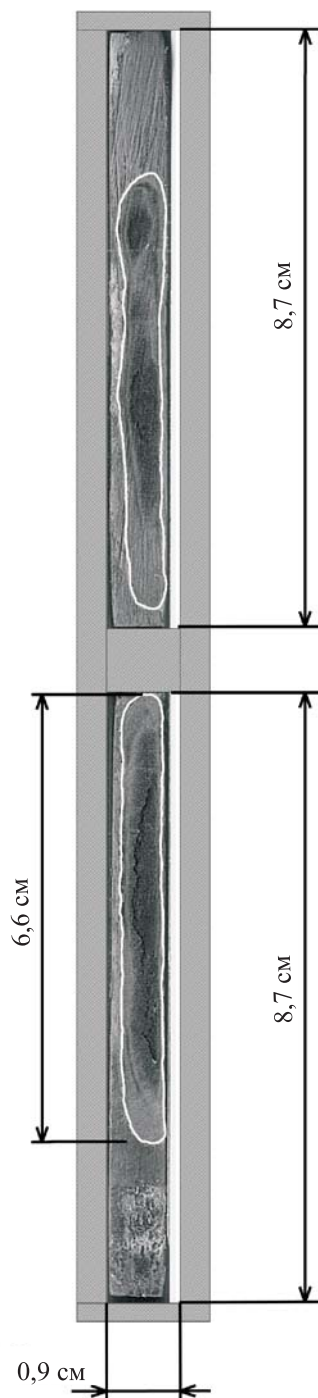


Рис. 6. Отпечаток пучка на графитовой мишени при $Z = 50$ см

ния причин различия токов мы использовали отпечатки пучков на указанных фольгах. При прохождении сквозь фольгу пучок нагревал материал фольги до испарения и тем самым создавал в ней отверстие с сечением, близким к сечению пучка. Судя по представленным на рис. 5, а отпечаткам пучков, которые были получены в том же выстреле, что и осциллограммы на рис. 4, оба отпечатка пучков смещены вверх от оси канала на расстояние около 1,5 см, так что нижний пучок (осциллограмма $I_{\text{beam } 2}$) частично попадает на металлический брусок, отделяющий транспортные каналы. Вследствие этого возникло заниженное значение тока этого пучка на осциллограмме, представленной на рис. 4. Причиной послужило несовпадение направления силовых линий ведущего магнитного поля с направлением оси канала. В данном случае угол между ними составлял около 0,01 рад. Для исправления этого эффекта, связанного с неточностями намотки на канал катушки ведущего поля, нами была использована дополнительная шина с током, которая практически полностью исключила этот недостаток, не испортив формы сечения пучка (рис. 5, б). Это привело к хорошему совпадению токов обоих пучков. Из сопоставления направлений смещения концов сечений пучков и искажения их формы, что зарегистрировано в этих экспериментах, с результатами моделирования поведения сечения (см. рис. 2) можно сделать вывод о том, что степень нейтрализации пучка по заряду f больше величины $1/\gamma^2$ — см. формулу (1), но далека от 1, иначе бы пучок сильно сжался по высоте. Некоторое несовпадение формы сечений, полученных в экспериментах, с расчетными формами с большой вероятностью связано с неоднородностью тока по сечению пучков, которая была непосредственно зарегистрирована при сбросе пучков на графитовые мишени, помещенные прямо в канал в средней его части на расстоянии 50 см от формирователя по ходу пучка (рис. 6). Таким образом, в соответствии с тем, что выбранная толщина пучков отличается от равновесной, в эксперименте зарегистрированы некоторые деформации сечения пучков на длине транспортировки 140 см. В то же время видно, что ленточная форма сечения сохранилась. Более того, зазор между пучком и стенкой остался на уровне 0,1 см при распространении пучков на расстояние 50 см. В итоге можно ожидать, что на проме-

жутке длиной 70 см за формирователем, где будет помещен резонатор, отклонения формы сечения пучков будут небольшие и допустят проведение экспериментов по генерации терагерцового излучения.

Заключение

1. В ходе компьютерного моделирования выбрана схема одновременной генерации двух ленточных пучков в диоде с магнитной изоляцией и их последующей транспортировки в щелевых каналах.

2. Проведен цикл экспериментов по выбранной схеме генерации двух пучков, в которых измерены макроскопические параметры пучков. В эксперименте получены одновременно два близких по всем параметрам ленточных пучка с сечением $0,4 \times 7$ см при плотности тока до $1,5 \text{ кА/см}^2$.

3. Теоретический анализ демонстрирует перспективность использования полученных пучков в двухстадийной схеме генерации мощного терагерцового излучения на базе планарного МСЭ миллиметрового диапазона.

Список литературы

1. Arzhannikov A. V., Ginzburg N. S., Nikolaev V. S. et al. FEL driven by high current ribbon REB and operated with two dimensional feedback // 14th International FEL Conference. Kobe, Japan, 1992. Technical Digest.

2. Arzhannikov A. V., Ginzburg N. S., Peskov N. Yu. et al. Super-power free electron lasers with two-dimensional distributed feedback // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 1995. A358. P. 189–192.

3. Ginzburg N. S., Peskov N. Yu., Sergeev A. S. et al. Theory and design of a free-electron maser with two-dimensional feedback driven by a sheet electron beam // Phys. Rev. E. 1999. Vol. 60. No. 1. P. 935–945.

4. Arzhannikov A. V., Ginzburg N. S., Ivanenko V. G. et al. Investigation of mode structure for mm-wave radiation pulses generated by planar FEM at 2-D distributed feedback //

Abstracts of 16th International Conference on High-Power Particle Beams. BEAMS' 2006. Oxford, UK, 2006. No. 19.

5. Аржанников А. В., Гинзбург Н. С., Заславский В. Ю. и др. Исследование генерации миллиметрового излучения в планарном мазере на свободных электронах с комбинированным брэгговским резонатором // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2006. Т. 1, вып. 2. С. 71–81.

6. Konoplev I. V., Cross A. W., Ginzburg N. S. et al. Study of co-axial free electron maser based on two-dimensional distributed feedback // Proc. of VI International workshop «Strong microwaves in plasmas». N. Novgorod, Russia, 2006. Vol. 1. P. 208–213.

7. Arzhannikov A. V., Ginzburg N. S., Kalinin P. V. et al. Intercavity scattering scheme for two-stage generation of submillimeter radiation on the base of planar 2D bragg FEM // Proc. VI International workshop «Strong Microwaves in Plasmas». N. Novgorod, Russia, 2006. Vol. 1. P. 228–232.

8. Arzhannikov A. V., Sinitsky S. L. Reduction of angular spread at nonadiabatic electron motion in magnetically insulated diode // Proc. of 11th International Conference on High Power Particle Beams. Contr. Prague, 1996. Vol. 1. P. 367–370.

9. Arzhannikov A. V., Astrelin V. T., Bobylev V. B. et al. Four-channel planar FEM for high-power mm-wave generation (theoretical and experimental problems) // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2003. Vol. A507. P. 129–132.

10. Астрелин В. Т., Ерофеев В. И. Двумерные равновесия электронного пучка в вращающемся магнитном поле // ЖТФ. 1989. Т. 59, вып. 2. С. 135–141.

11. Arzhannikov A. V., Astrelin V. T., Kapitono V. A. et al. Studies of microsecond ribbon REB generation and transport // Proc. of the 9th International Conference on High-Power Particle Beams. Novosibirsk, USSR, 1990. Vol. 1. P. 256–263.

Материал поступил в редколлегию 18.10.2007

КОГЕРЕНТНОСТЬ КОЛЕБАНИЙ ПУЧКА В ПОЛЕ СОБСТВЕННОГО ЗАРЯДА И ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУШЕК

Эффект собственного заряда всегда играет определяющую роль в электронных пушках. Когерентность зарядовых колебаний приводит к колебаниям эмиттанса пучка вдоль пушки. Это явление тесно связано с известной техникой «emittance compensation». В работе аналитически и численно получены простые и надежные оценки роста эмиттанса в пушках и их оптимальных параметров.

Ключевые слова: собственный заряд, электронная пушка, зарядовые колебания.

Введение

Эффект собственного заряда может существенно ухудшить эмиттанс и даже изменить характер движения пучка в канале. Для оценок эффекта удобно использовать уравнения Капчинского – Владимирского [1], преобразованные для среднеквадратичных величин:

$$\begin{cases} x'' = \frac{\varepsilon_x^2}{x^3} + \frac{I}{I_0(\beta\gamma)^3} \frac{1}{x+y} - \frac{e}{p} G_x x, \\ y'' = \frac{\varepsilon_y^2}{y^3} + \frac{I}{I_0(\beta\gamma)^3} \frac{1}{x+y} - \frac{e}{p} G_y y, \end{cases} \quad (1)$$

где x и y – горизонтальный и вертикальный среднеквадратичные размеры, а в индексах – соответствующие координаты; $''$ – вторая производная по независимой координате z ; ε , I , β , γ , G , e и p – эмиттанс, ток, безразмерная скорость, релятивистский фактор, фокусирующий градиент, заряд частицы и ее импульс соответственно; $I_0 = 4\pi \cdot mc^2 / Z_0 e$, ≈ 17 кА для электронов; $G_x = -G_y = G$ для фокусирующего в горизонтальном направлении квадрупольа, $G_x = G_y = eB^2 / 4p$ для соленида и $G_x = pr^2 / e$, $G_y = 0$ для диполя с кривизной траектории p .

Если члены с током в правой части (1) сравнимы или превышают члены с эмиттансом, одночастичная модель дает неверный результат. Таким образом, если не выполняется следующее («силовое») неравенство [2]

$$\frac{\varepsilon_y^2}{y^3} \gg \frac{I}{I_0(\beta\gamma)^3} \frac{1}{x+y} << \frac{\varepsilon_x^2}{x^3},$$

эффектом собственного заряда пренебречь нельзя. Другой, «фазовый», критерий выглядит так:

$$\frac{5}{16} \frac{I}{\varepsilon I_0(\beta\gamma)^3} L \ll 1,$$

где L – длина канала.

Термин «emittance compensation» впервые предложен, по-видимому, в [3] при анализе высокочастотных (ВЧ) электронных пушек. Автор заметил, что нормализованный эмиттанс колеблется вдоль пушки и для минимизации его на выходе должен быть подобран оптимальный набег фазы. По мнению автора, это происходит в результате периодического сближения фазовых портретов сечений сгустка. Метод был существенно формализован и развит в [4] и последующих работах. Некоторые результаты, обсуждаемые здесь, можно найти также в [2; 5–8]. Термин «emittance compensation» весьма неудачен, так как совершенно не отражает суть процесса. Поскольку в русскоязычной литературе устоявшегося названия явления нет, предлагается использовать «когерентность зарядовых колебаний» для обозначения колебаний эмиттанса под действием собственного заряда.

Основные явления и уравнения

Рассмотрим сначала эффект продольной неоднородности заряда. Разделим сгусток на ряд поперечных сечений (слоев). Следуя [4], предположим, что каждый слой движется независимо от прочих. Это предположение достаточно точно, если в сопровождающей системе координат длина сгустка

много больше его поперечных размеров. Предположим также, что каждый слой однородно заряжен, имеет эллиптическую симметрию, как в [1], пренебрежимо малый эмиттанс и движется в канале с линейной фокусировкой. Тогда, подставив $I/I_0(\beta\gamma)^3 = j$, $G_x e/p = g$ и $G_y e/p = h$ в (1), получим

$$\begin{cases} x'' = \frac{j}{x+y} - gx, \\ y'' = \frac{j}{x+y} - hy. \end{cases} \quad (2)$$

Пока что продольный импульс и j считаем постоянными. Предположим, имеется решение (x, y) системы (2) для некоторых j и начальных условий. Назовем такое решение главным. Тогда движение другого слоя с током $j + \delta j$ (все величины с δ считаются малыми) подобно, если его размеры $\sqrt{(j + \delta j)/j}(x, y) \cong (1 + \delta j/2j)(x, y)$. Это главное решение для другого сечения. Итак, эмиттанс сгустка не растет, если все слои движутся по главным траекториям. Если сформировать сгусток таким образом, эффект продольной неоднородности будет полностью подавлен.

Если же начальные условия двух упомянутых слоев одинаковы (что обычно и бывает на эмиттере), состояние второго будет колебаться около главного решения. При этом имеются монополярная и квадрупольная моды, и их волновые числа отличаются в $\sqrt{2}$ раз [2]. Если система аксиально-симметрична, квадрупольная мода отсутствует, и фазовые портреты слоев периодически расходятся и сходятся (рис. 1). Очевидно, при этом эмиттанс сгустка осциллирует. Основное уравнение движения получается из (2) подстановкой $y = x$.

Теперь перейдем к эффекту поперечной неоднородности заряда. Он является главным для стационарных пучков и может также значительно влиять на эмиттанс сгустков. Рассмотрим аксиально-симметричный стационарный пучок, или, что в данном случае то же самое, слой сгустка с неоднородным радиальным распределением заряда. Тогда уравнение движения частицы на расстоянии x от оси будет

$$x'' = \frac{\tilde{I}}{I_0(\beta\gamma)^3} \frac{2}{x} - gx = \frac{2\tilde{j}}{x} - gx, \quad (3)$$

где $\tilde{I}$ – ток внутри цилиндра с радиусом x . Теперь предположим, что движение частиц ламинарно, т. е. если в некоторый момент для двух частиц $x_1 > x_2$, то это сохраняется всегда. Это условие не всегда выполняется, но нарушается оно, как правило, в разреженном гало пучка, так что это нарушение мало влияет на оценку эмиттанса. Если радиальное распределение заряда неоднородно, траектории частиц не могут быть подобными, и ситуация выглядит, как на рис. 2.

Для оценок эмиттанса удобно использовать линеаризованное безразмерное уравнение движения. Рассмотрим безразмерное отклонение от главной траектории $\delta = \delta x/x$, сделаем соответствующую подстановку в (2), отбросим все высшие по δ члены и получим

$$\delta'' + \left(2 \frac{x'}{x} + \frac{(\beta\gamma)'}{\beta\gamma} \right) \delta' = - \frac{j}{x^2} \delta. \quad (4)$$

Аналогичная подстановка в (3) дает очень похожее уравнение, но вместо j в правой части $4\tilde{j}$.

Как и любое линейное обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) второго порядка, (4) определяет матрицу преобразования между двумя любыми точками канала z_0 и z_1 :

$$\mathbf{M}(z_0, z_1) = \begin{pmatrix} C & S \\ C' & S' \end{pmatrix},$$

где (C, C') и (S, S') – это величины (δ, δ') в z_1 , если в z_0 они $(1, 0)$ и $(0, 1)$ соответственно. Это широко известные $\cos$ - и $\sin$ -подобные траектории. В общем случае коэффициент при δ' в (4) не равен нулю, так что $\det \mathbf{M}$ не обязательно единица [9]

$$\det \mathbf{M}(z_0, z_1) = \exp \left(- \int_{z_0}^{z_1} \left(2 \frac{x'}{x} + \frac{(\beta\gamma)'}{\beta\gamma} \right) dz \right) = \left(\frac{x_0}{x_1} \right)^2 \frac{(\beta\gamma)_0}{(\beta\gamma)_1}.$$

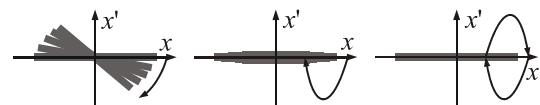


Рис. 1. Фазовые портреты сечений сгустка

Матрица преобразования однородного канала, в котором x, j и $\beta\gamma = \text{const}$,

$$\mathbf{M}(z_0, z_1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \frac{x}{\sqrt{j}} \sin \varphi \\ -\frac{\sqrt{j}}{x} \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix},$$

где $\varphi = (z_1 - z_0)\sqrt{j}/x$. Это, по-видимому, единственный случай, когда набег фазы зарядовых колебаний определяется абсолютно корректно, т. е. набег фазы участков аддитивны и коммутативны. Тем не менее нас интересуют только сос-подобные траектории, поскольку обычно $\delta' = 0$ на эмиттере. Тогда набег фазы в канале можно определить, сопоставив последний с однородным каналом. Однородный канал соответствует данному, если x, j и $\beta\gamma$ в первом и в конце второго совпадают, а также совпадают отношение и знаки C и C' обоих. В этом случае набег фазы в произвольном канале составляет

$$\varphi = \arctan \left(\frac{-C'x}{C\sqrt{j}} \right), \quad (5)$$

где квадрант выбран так, чтобы знаки $\cos \varphi$ и $\sin \varphi$ совпадали с таковыми у C и C' соответственно.

Определенная таким образом фаза обладает некоторыми полезными свойствами. Если к произвольному каналу с набегом φ добавить однородный канал с набегом $\pi - \varphi$ и x, j и $\beta\gamma$ во втором совпадают с таковыми в конце первого, полный набег фазы будет π :

$$\begin{pmatrix} \cos(\pi - \varphi) & \frac{x}{\sqrt{j}} \sin(\pi - \varphi) \\ -\frac{\sqrt{j}}{x} \sin(\pi - \varphi) & \cos(\pi - \varphi) \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} a \cos \varphi & * \\ -a \frac{\sqrt{j}}{x} \sin \varphi & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a & * \\ 0 & * \end{pmatrix}.$$

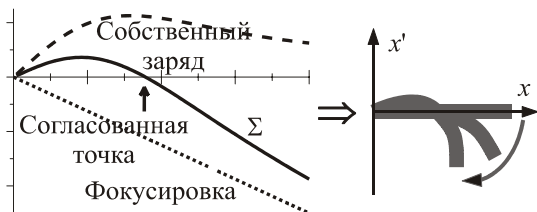


Рис. 2. Движение гауссова пучка

Аналогичная ситуация с дополнением до 2π . В [5] и [2] показано, что фазовые портреты слоев складываются, а фазовый портрет слоя выпрямляется при $\delta' = 0$, что эквивалентно $\varphi = n\pi$, где n – целое.

Набор участков с набегам, кратными π , также обладает набегом, кратным π . Это – следствие того факта, что произведение верхних треугольных матриц есть верхняя треугольная матрица. Если количество участков с набегом π нечетно, общий набег будет π . В противном случае – 2π . Во всех случаях x, j и $\beta\gamma$ на границах должны совпадать.

Следует подчеркнуть, что определенная выше зарядовая фаза не есть бетатронная фаза, а некоторая аналогия происходит из-за сходства порождающих уравнений, и определение (5) удобно для анализа эмиттанса пучков и не является единственно возможным.

Дифференциальные характеристики сгустка

Пусть имеется сгусток с неоднородным продольным и однородным поперечным распределением заряда и известны зависимости тока $I(\zeta)$, размера $x(\zeta)$ и наклона $x'(\zeta)$ от продольной координаты в сгустке ζ . Попробуем по этим данным определить относительную амплитуду и фазу зарядовых колебаний слоев. Для этого необходимы некоторые дополнительные предположения. Предположим, что в начальном состоянии все слои сгустка имели одинаковый (неизвестный нам) размер и нулевой наклон. Такая ситуация типична, если сгусток родился на плоском эмиттере. Считаем, что рассматриваемый слой ζ движется по главной траектории. Тогда главный размер x_0 другого слоя $\propto \sqrt{j}$, так что

$$\frac{dx_0}{d\zeta} = \frac{x}{2j} \cdot \frac{dj}{d\zeta}.$$

На эмиттере

$$\begin{aligned} \delta x_e &= -\frac{dx_0}{d\zeta} \delta\zeta = -\frac{x_e}{2j} \cdot \frac{dj}{d\zeta} \delta\zeta \Rightarrow \delta_e = \\ &= -\frac{1}{2j} \cdot \frac{dj}{d\zeta} \delta\zeta, \\ \delta_e' &= 0. \end{aligned}$$

В точке наблюдения

$$\begin{aligned} \delta x &= \left(\frac{dx}{d\zeta} - \frac{x}{2j} \frac{dj}{d\zeta} \right) \delta\zeta \Rightarrow \\ \Rightarrow \delta &= \left(\frac{1}{x} \frac{dx}{d\zeta} - \frac{1}{2j} \frac{dj}{d\zeta} \right) \delta\zeta, \end{aligned}$$

$$\delta x' = \left(\frac{dx'}{d\zeta} - \frac{x'}{2j} \frac{dj}{d\zeta} \right) \delta \zeta \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \delta' = \left(\frac{dx'}{d\zeta} - \frac{x'}{x} \frac{dx}{d\zeta} \right) \frac{\delta \zeta}{x}.$$

Тогда зарядовая фаза, согласно определению (5) (не забываем, что на эмиттере $\delta_e < 0!$):

$$\varphi = \arctan \frac{\frac{dx'}{d\zeta} - \frac{x'}{x} \frac{dx}{d\zeta}}{\frac{1}{2\sqrt{j}} \frac{dj}{d\zeta} - \frac{\sqrt{j}}{x} \frac{dx}{d\zeta}}. \quad (6)$$

Разумеется, квадрант выбирается так, чтобы знаки $\sin \varphi$ и $\cos \varphi$ совпадали с таковыми у числителя и знаменателя соответственно. Относительная амплитуда колебаний, т. е. отношение локальной амплитуды к амплитуде на эмиттере:

$$A = \frac{\sqrt{\delta^2 + \left(\frac{x}{\sqrt{j}} \delta' \right)^2}}{|\delta_e|} =$$

$$= \frac{\sqrt{\left(\frac{2j}{x} \frac{dx}{d\zeta} - \frac{dj}{d\zeta} \right)^2 + 4j \left(\frac{dx'}{d\zeta} - \frac{x'}{x} \frac{dx}{d\zeta} \right)^2}}{\left| \frac{dj}{d\zeta} \right|}. \quad (7)$$

Для того чтобы вычислить подобные характеристики слоя или стационарного пучка при рассмотрении поперечной неоднородности заряда, в качестве независимой переменной можно взять поперечную координату частицы x . Опять-таки, главный размер $x_0 \propto \sqrt{j}$, так что

$$\frac{dx_0}{dx} = \frac{x}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx}.$$

На эмиттере

$$\delta x_e = \left(1 - \frac{dx_0}{dx_e} \right) \delta x = \left(1 - \frac{x_e}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx_e} \right) \delta x \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \delta_e = \left(\frac{1}{x_e} - \frac{1}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx_e} \right) \delta x,$$

$$\delta_e' = 0. \quad (9)$$

В этом случае типично $\delta_e > 0$. Это справедливо, если $d\tilde{j}/dx < 2\tilde{j}/x$, что выполняется тогда и только тогда, когда плотность тока

строго убывает от центра к периферии. В точке наблюдения:

$$\delta x_{po} = \left(1 - \frac{dx_0}{dx} \right) \delta x = \left(1 - \frac{x}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx} \right) \delta x \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \delta_{po} = \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx} \right) \delta x, \quad (10)$$

$$\delta x'_{po} = \left(\frac{dx'}{dx} - \frac{x'}{2\tilde{j}} \frac{d\tilde{j}}{dx} \right) \delta x \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \delta'_{po} = \left(\frac{dx'}{dx} - \frac{x'}{x} \right) \frac{\delta x}{x}. \quad (11)$$

Тогда зарядовая фаза, согласно определению (5) (на эмиттере $\delta_e > 0!$)

$$\varphi = \arctan \frac{\frac{x'}{x} - \frac{dx'}{dx}}{\frac{2\sqrt{j}}{x} - \frac{1}{\sqrt{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx}}. \quad (12)$$

Чтобы вычислить относительную амплитуду зарядовых колебаний, необходимо соотносить δx и $\delta x'$ в парах (8), (9) и (10), (11). Это не одно и то же, поскольку в первом случае это относится к эмиттеру, а во втором – к точке наблюдения. Из закона сохранения заряда следует, что $\tilde{j}/\tilde{j}$ сохраняется, т. е. δx следует заменить на $\tilde{j}/(d\tilde{j}/dx)$ в соответствующем месте:

$$A = \frac{\tilde{j}}{d\tilde{j}/dx} \cdot \frac{\sqrt{\left(\frac{1}{x} - \frac{1}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx} \right)^2 + \frac{1}{4\tilde{j}} \left(\frac{dx'}{dx} - \frac{x'}{x} \right)^2}}{\frac{\tilde{j}}{d\tilde{j}/dx_e} \cdot \left(\frac{1}{x_e} - \frac{1}{2\tilde{j}} \cdot \frac{d\tilde{j}}{dx_e} \right)} =$$

$$= \frac{\sqrt{\left(\frac{dx}{d\tilde{j}} \cdot \frac{\tilde{j}}{x} - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{\tilde{j}}{4} \left(\frac{dx'}{d\tilde{j}} - \frac{dx}{d\tilde{j}} \cdot \frac{x'}{x} \right)^2}}{\frac{dx_e}{d\tilde{j}} \cdot \frac{\tilde{j}}{x_e} - \frac{1}{2}}. \quad (13)$$

Величины без индексов относятся к точке наблюдения, а с нижним индексом e – к эмиттеру.

Макроскопический эффект собственного заряда в пушках

Источник электронов (а также протонов или ионов) всегда эмиттирует частицы с весьма малой энергией. Таким образом, влияние собственного заряда наиболее сильно именно вблизи эмиттера. К сожалению, модель, изложенная в предыдущем

разделе, совершенно не работает в этой области по следующим причинам.

1. Вблизи эмиттера всегда присутствуют металлические электроды с фиксированным потенциалом. Распределение заряда на них зависит от распределения заряда в пучке и создает поля, сопоставимые с собственным полем пучка. Таким образом, влияние электродов является определяющим вблизи эмиттера. Кроме того, поперечные силы, создаваемые зарядом электродов, вообще говоря, нелинейны.

2. Если пучок нестационарный (состоит из сгустков), то всегда найдется область, где энергия частиц достаточно мала и длина сгустка в сопровождающей системе координат сравнима или меньше его поперечных размеров. В этом случае взаимодействие между слоями с разным током существенно.

3. Если пучок нестационарный, голова и хвост сгустка находятся в разных условиях – в тот момент, когда рождается голова, сгустка еще нет, а когда хвост – он уже есть. В процессе же ускорения за головой находится часть сгустка с меньшей энергией, а перед хвостом – с большей, так что поперечные силы в этих двух случаях различаются из-за нелокальности взаимодействия. Таким образом, набранный поперечный импульс зависит не только от тока в слое, но и от его координаты в сгустке.

Если эмиттер круглый и однородный и пучок стационарный, геометрия пушки может быть оптимизирована так, чтобы собственный заряд не приводил к увеличению эмиттанса. Пример – известная пушка Пирса. В то же время продольная неоднородность тока в сгустке всегда ухудшает эмиттанс, так как пушка оптимальна лишь для какого-то определенного тока, а фазовые портреты сечений с другими токами искривлены и повернуты относительно оптимального. Это приводит к росту как эмиттансов слоев с неоптимальными токами (из-за нелинейной трансформации их фазовых портретов), так и полного эмиттанса сгустка (из-за поворота фазовых портретов различных слоев).

Движение частиц в одной и той же пушке будет подобно (только в нерелятивистском случае!), если напряжение и ток связаны законом $\frac{3}{2} - I \propto U^{3/2}$. Тогда эмиттанс пучка не зависит от напряжения и тока. Определим меру качества пушки

как отношение $\varepsilon / (r_e \sqrt{j})$, где r_e – радиус эмиттера. Посмотрим, как она зависит от напряжения и тока. В нерелятивистском случае

$$\beta\gamma \equiv \sqrt{\frac{2eU}{mc^2}} \propto \sqrt{U} \Rightarrow j = \frac{I}{I_0 (\beta\gamma)^3} \propto \frac{U^{3/2}}{U^{3/2}} = \text{const},$$

так что мера качества (ε и $r = \text{const}$) зависит только от геометрии пушки. В то же время яркость $I/\varepsilon_n^2 \propto \sqrt{U}$. При пропорциональном изменении всех геометрических размеров пушки и сохранении плотности тока с эмиттера $\varepsilon \propto r, I \propto r^2, U \propto r^{4/3}$, так что показатель качества

$$\frac{\varepsilon}{r_e \sqrt{j}} \propto \frac{r_e (\beta\gamma)^{3/2}}{r_e \sqrt{I}} \propto \frac{U^{3/4}}{r_e} = \text{const}.$$

Яркость при этом пропорциональна $\sqrt{U}/r_e^2$.

Остается лишь найти коэффициент при $r_e \sqrt{j}$ в выражении для эмиттанса и оптимальное соотношение размеров эмиттера и пушки. Еще один важный параметр – фаза зарядовых колебаний на выходе из пушки, поскольку канал после нее должен давать недостающий до 2π набег, чтобы компенсировать разворот фазовых портретов слоев. Кроме того, этот канал должен также правильно фазировать зарядовые колебания в слоях, связанные с поперечной неоднородностью заряда. Таким образом, в корректирующем канале всегда имеет место совместный эффект продольной и поперечной неоднородностей заряда.

Для того чтобы найти коэффициент качества и параметры корректирующего канала, рассмотрим несколько различных модельных электронных пушек и проанализируем их. Для расчета электронных пушек использовался «SAM» [10] – двумерный код для стационарного режима. Код позволяет считать пушки с аксиально-симметричной либо планарной геометрией. Мы использовали первую возможность. Для каждой геометрии и разных токов эмиттера рассчитывались фазовые портреты на выходе пушки. Каждый такой результат трактовался как состояние слоя сгустка с соответствующим током. Первая рассчитанная геометрия изображена на рис. 3.

Условное название пушки – «300kvGun». Пушка диодного типа, геометрия катодного электрода подобрана так, чтобы минимизировать эмиттанс пучка с током 2 А при напряжении 300 кВ. Радиус эмиттера $r_e = 5$ мм, расстояние до анодного электрода $l = 123$ мм. Ее первеанс $1,212 \cdot 10^{-8}$ А/В^{3/2}, а «естественный» ток эмиттера 1,99 А. Именно такой ток течет с катода при ограничении собственным зарядом. Максимальный допустимый ток в данной геометрии при напряжении 300 кВ составляет чуть более 3,3 А. При этом плотность тока катода принудительно задается однородной, а начальная энергия электронов при тока 2 А составляет 100 эВ. При других токах эта энергия пропорциональна $I^{2/3}$. Превышение вызывает диагностику «на расстоянии... образуется виртуальный катод». Рассчитанные параметры слоев в зависимости от тока приведены на рис. 4. Все параметры – среднеквадратичные.

Этих данных достаточно, чтобы восстановить дифференциальные характеристики сгустка – зарядовую фазу и относительную амплитуду зарядовых колебаний на выходе пушки. Воспользуемся для этого формулами (6) и (7). В качестве независимой координаты ζ удобно взять ток слоя I . Зависимости зарядовой фазы и амплитуды от тока для описанной пушки показаны на рис. 5. Видно, что в пределах от 1 до 3 А фаза почти не зависит от тока и составляет около $2,5 \approx 0,8\pi$. Таким образом, если после пушки поместить идеальный однородный канал (т. е. такой, в котором набег фазы не зависит от амплитуды) с набегом фазы $\approx 1,2\pi$, следует ожидать, что эмиттанс на выходе такой системы будет минимальным. Остаются лишь вопросы: сгусток с каким пиковым током и заданным продольным распределением (например, гауссовым) даст наименьший эмиттанс в такой системе; с каким слоем такого сгустка должен быть согласован канал после пушки и каков в нем набег фазы.

Выше мы рассмотрели движение слоев сгустка и вычислили дифференциальные характеристики сгустка. Однако интерес представляют также дифференциальные характеристики слоев, поскольку из-за нелинейности фокусировки в пушке поперечное распределение заряда становится неоднородным и проявляется эффект поперечной неоднородности собственного заряда. Фазу в пределах каждого слоя найдем из (12) – это не представляет трудностей. А вот вы-

числять относительную амплитуду из (13) невозможно, так как вблизи однородного эмиттера все частицы в слое движутся по подобным траекториям, зарядовые колебания не возбуждаются и знаменатель равен нулю. Тем не менее значение числителя (13) также информативно, поскольку характеризует амплитуду колебаний. На рис. 6 показана фаза зарядовых колебаний в зависимости от тока слоя и относительной начальной поперечной координаты. На карте видны два не очень ровных плато: первое в пределах токов от 1 до 2 А со значением фазы ≈ 4 и второе в пределах токов от 2,3 до 3,3 А со значением фазы ≈ 1 . Как видно, фаза внутри слоев не имеет какого-то преобладающего значения, как на рис. 5. Это означает, что коррекция эффекта поперечной неоднородности заряда тут вряд ли возможна. С другой стороны, эмиттансы слоев достаточно малы по сравнению с проекционным, так что заботиться надлежит, в основном, об эффекте продольной неоднородности. На рис. 7 приведена карта амплитуд – значение числителя (13), в координатах ток слоя – начальная поперечная координата.

Почти на всей плоскости $A \ll 1$. Исключение составляет небольшая область около

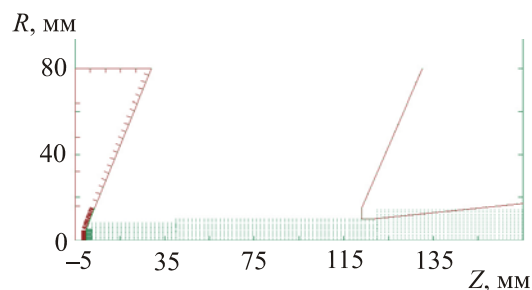


Рис. 3. Геометрия пушки «300kvGun». Сплошные линии – электроды

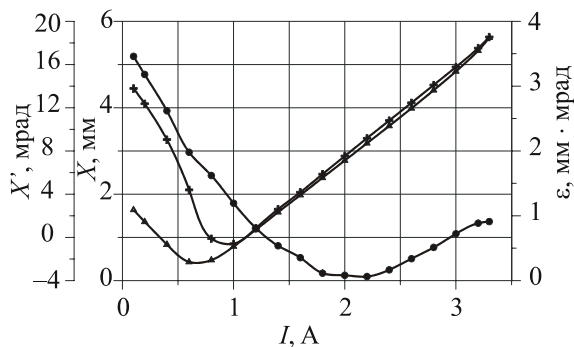


Рис. 4. Параметры слоя в зависимости от тока: среднеквадратичный размер (Δ), его наклон ($+$), эмиттанс ($\bullet$)

$I \approx 0,8$ А, $x/x_{\max} \approx 0,9$. Для сравнения: для гауссова слоя эта усредненная амплитуда, т. е. знаменатель (13), составляет 18,17. Таким образом, влияние поперечной неоднородности заряда на эмиттанс в данной пушке пренебрежимо мало.

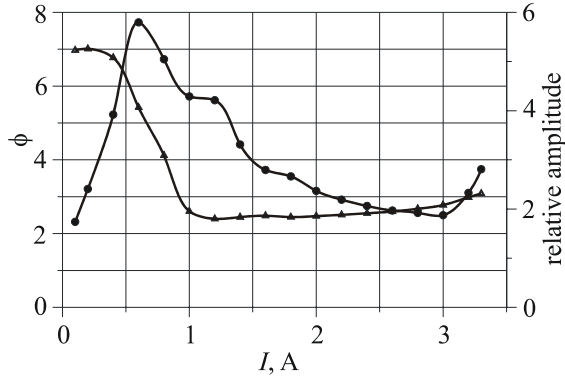


Рис. 5. Дифференциальные параметры сгустка в зависимости от тока слоя: фаза (Δ) и относительная амплитуда (●) зарядовых колебаний

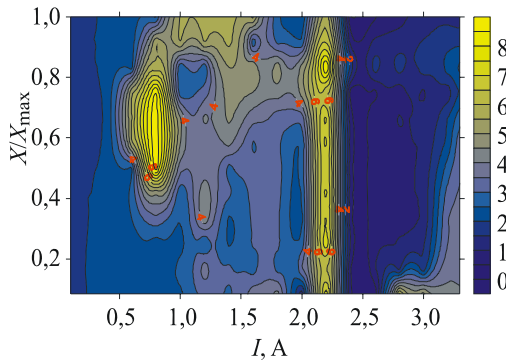


Рис. 6. Фаза зарядовых колебаний в слоях сгустка в зависимости от тока и относительной начальной поперечной координаты

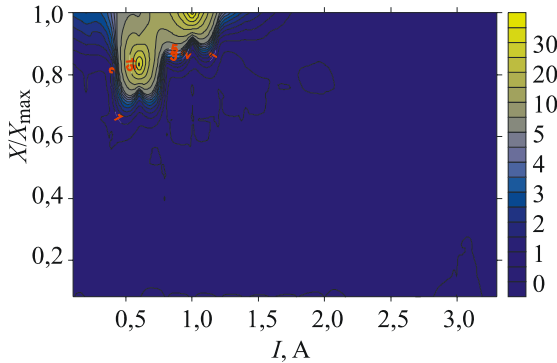


Рис. 7. Амплитуда зарядовых колебаний в слоях сгустка в зависимости от тока и относительной начальной поперечной координаты

Как при рассмотрении совместного эффекта пространственного заряда, считаем, что слои движутся независимо и движение каждого ламинарно. Идеальный канал с набегом фазы φ , согласованный со слоем с током j_0 , среднеквадратичным размером x_0 и наклоном x'_0 , преобразует координаты и наклоны частиц следующим образом:

$$x' \rightarrow x' - x \cdot (x'_0 / x_0),$$

$$\begin{cases} x \rightarrow x_0 + (x - x_0) \cos \varphi + x'_0 / \sqrt{j} \sin \varphi, \\ x' \rightarrow x' \cos \varphi - (x / x_0 - 1) \sqrt{j} \sin \varphi. \end{cases} \quad (13)$$

Разработанный для моделирования пушки с идеальным каналом код «GunEmitLine» получает исходные данные – радиусы и наклоны трубок тока в каждом слое – от «SAM», преобразует их согласно (13) и вычисляет необходимые для нахождения эмиттанса среднеквадратичные величины для гауссова (в продольном направлении) сгустка с заданным пиковым током:

$$\langle \xi \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi} N^2} \int_0^{I_p} \int_0^N \xi(I, n) n dn \frac{dI}{I \sqrt{\ln(I_p / I)}},$$

где n – номер трубки тока; N – их число; I – ток слоя, а I_p – заданный пиковый ток. Далее вычисляется среднеквадратичный эмиттанс по стандартной формуле. Наконец, ищется $\min(\epsilon(j_0, \varphi))$. Если задать $\varphi = 0$, будет вычислен эмиттанс сгустка на выходе пушки без канала. На рис. 8 показана зависимость эмиттанса сгустка с пиковым током 2,2 А (продольное распределение гауссова) от тока согласованного слоя и набега фазы в канале. Оптимум 1,03 мм·мрад достигается при согласованном токе 1,043 А и набеге фазы в компенсирующем канале $3,91 \pm 1,246\pi$. Если не добавлять компенсирующий канал, эмиттанс при том же пиковом токе составит 6,63 мм·мрад.

На рис. 9 приведены зависимости эмиттанса и показателя качества $\epsilon^c = \epsilon / (x_e \sqrt{j})$, где x_e – среднеквадратичный размер пучка на эмиттере (в данном случае – однородной плотности тока эмиттера – половина радиуса эмиттера), от пикового тока на выходе данной пушки (200 мм от эмиттера) без канала и с оптимальным идеальным каналом. Видно, что в обоих случаях эмиттанс растет почти пропорционально корню из пикового тока при $I_p > 0,8$ А. Соответственно $\epsilon^c \approx \text{const}(I)$.

Добавку к коэффициенту качества из-за неидеальности корректирующего канала можно оценить как (3.6), (3.108) и Table 3.1 из [2]:

$$\Delta \varepsilon^c \approx 0,037 \frac{x_0}{x} A^3 \frac{\varphi}{2\pi} \approx 0,13,$$

где все параметры относятся к согласованному слою. Таким образом, неидеальность канала (зависимость частоты колебаний от амплитуды) может существенно ослабить его эффект.

Для исследования этого вопроса добавим к пушке «реальный» канал, состоящий из пустого промежутка длиной L_1 , тонкой линзы силой D и еще одного промежутка длиной L_2 . Попробуем достичь похожих результатов в такой системе. Код «GunNLine», моделирующий простейший неоднородный канал, аналогичен «GunEmitLine», но преобразование в канале нелинейное, в соответствии с (3). Оптимизация эмиттанса производится по трем переменным: L_1 , L_2 и D . На рис. 10 показана зависимость эмиттанса сгустка с пиковым током 2,2 А от L_2 и D для той же пушки. При этом всегда $L_1 = 0,25L_2$. Как обычно, виден овраг вдоль линии равной фазы, дно которого меняет свою глубину.

Следующий шаг – не фиксируем отношение L_1/L_2 и для каждой пары (L_1 , L_2) находим минимум эмиттанса по D . Результат приведен на рис. 11. Минимум эмиттанса достигается в точке $L_1 = 0,0362$ м, $L_2 = 0,1942$ м. Оптимальная сила линзы при этом $8,50 \text{ м}^{-1}$, а значение эмиттанса $1,087 \text{ мм} \cdot \text{мрад}$. Минимум эмиттанса достигается в точке $L_1 = 0,0362$ м, $L_2 = 0,1942$ м. Оптимальная сила линзы при этом $8,50 \text{ м}^{-1}$, а значение эмиттанса $1,087 \text{ мм} \cdot \text{мрад}$.

Наконец, результаты оптимизации канала по всем трем параметрам показаны на рис. 9, а параметры оптимального канала – на рис. 12. Видно, что добавление оптимального канала эффективно для пиковых токов от 1,3 до 3,3 А – эмиттанс улучшается в 3...6 раз, а сила линзы не слишком велика. При меньших пиковых токах эффективность канала резко снижается, а необходимая сила линзы достигает 30 м^{-1} . Коэффициент качества практически постоянен в пределах пикового тока 1,8...3,3 А и составляет 0,052...0,071. Следовательно, эмиттанс

$$\begin{aligned} \varepsilon &\cong 0,052...0,071 x_e \sqrt{j} \cong \\ &\cong 0,026...0,036 r_e \sqrt{\frac{I}{I_0 (\beta\gamma)^3}}. \end{aligned}$$

Для того чтобы выяснить, как влияет геометрия пушки на ее качество и параметры корректирующего канала, все те же вычисления были проведены также для следующих пушек:

- «150kvGun» – укороченная вдвое исходная пушка (напряжение 150 кВ);

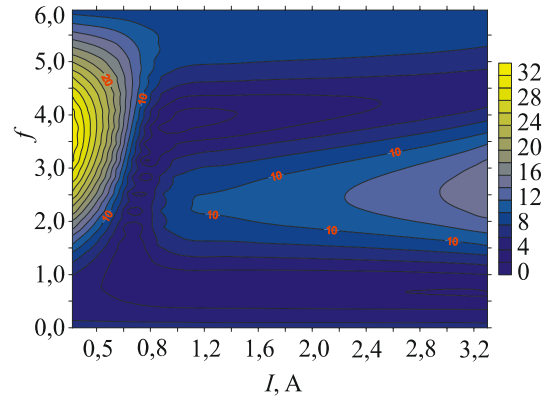


Рис. 8. Эмиттанс, мм · мрад, сгустка с пиковым током 2,2 А в зависимости от набега зарядовой фазы в канале и тока согласованного слоя

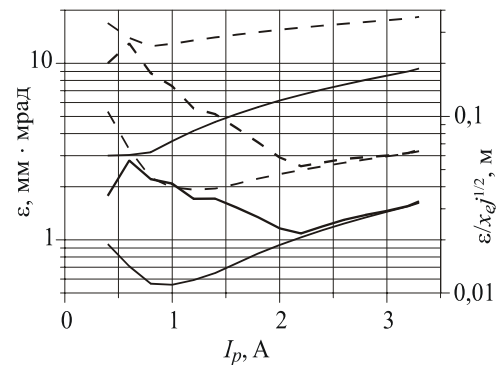


Рис. 9. Эмиттанс (сплошные линии) и показатель качества (пунктир) в зависимости от пикового тока сгустка. Верхние – на выходе пушки, нижние – с оптимальным идеальным каналом, средние – с оптимальным неоднородным каналом

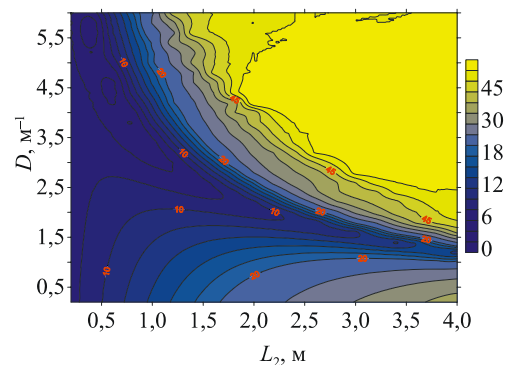


Рис. 10. Эмиттанс сгустка, мм · мрад, с пиковым током 2,2 А в зависимости от длины второго пустого промежутка в неоднородном канале и силы линзы

- «300kvShortGun» – пушка той же длины, но добавлен электрод с распределенным потенциалом (первеанс, как у исходной, напряжение 300 кВ);

- «850kvGun» – удлиненная вдвое исходная пушка (напряжение 850 кВ);

- «300kvLongGun» – пушка той же длины, но добавлен электрод с распределенным потенциалом (первеанс, как у исходной, напряжение 300 кВ);

- «300kvLongGunPl» – весьма похожа на предыдущую, но прикатодный электрод совершенно плоский, т. е. геометрия сильно отличается от пирсовской (напряжение 300 кВ);

- «RFGun1MV» – модель фотоэлектронной высокочастотной 1,3 ГГц пушки, только первая ячейка (смоделировано и магнитное ВЧ поле, напряжение 1 МВ);

- «RFGun2MV» – та же пушка, но напряжение вдвое выше; добавлена для выяснения зависимости от напряжения, поскольку случай явно релятивистский.

Параметры всех этих пушек сведены в табл. 1. Условные обозначения следующие: ε_0^c – показатель качества пушки, коррекции нет; ε_h^c – показатель качества пушки с оптимальным идеальным однородным каналом; I_m – ток согласованного слоя в этом канале; φ – набег фазы в этом канале; I_p – пиковый ток сгустка; ε_r^c – показатель качества пушки с оптимальным неоднородным каналом. Из данных таблицы можно заключить, что наилучший показатель качества составляет $\approx 0,02$ и достигается в моделях фотоэлектронных ВЧ пушек с оптимальным неоднородным каналом. Качество некорректированных пушек также наилучшее в этих случаях. Пушка «300kvLongGunPl» лишь немногим уступает в качестве двум предыдущим. Отсюда можно заключить, что плоский катодный электрод значительно лучше

квазипирсовой геометрии (как у всех остальных пушек), если пушка импульсная, и фронт и спад составляют значительную часть импульса. Разумеется, при этом эмиттансы слоев больше, но вклад их в проекционный эмиттанс сгустка невелик. В то же время большее поле вблизи катода (из-за более равномерного его распределения в зазоре пушки) уменьшает действие продольной неоднородности заряда. Итак, ожидаемый нормализованный эмиттанс на выходе системы из правильно сконструированной пушки и оптимального неоднородного корректирующего канала составляет

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &\approx 0,017...0,025x_e\sqrt{\frac{I_p}{I_0\beta\gamma}} \cong \\ &\cong 0,0085...0,013r_e\sqrt{\frac{I_p}{I_0\beta\gamma}}.\end{aligned}\quad (14)$$

Продольное распределение электронов в сгустке полагается гауссовым.

Насколько же параметры реальных пушек приблизились к означенному пределу? В табл. 2 приведены параметры лучших (с точки зрения показателя качества) созданных к настоящему времени импульсных пушек. Рассматривались только те машины, для которых эмиттанс и пиковый ток имели критическое значение. В третьей колонке приведена энергия электронов на выходе первой ячейки пушки (которая примерно вдвое короче остальных). Дело в том, что собственно «пушкой» является как раз эта ячейка. Остальные же ячейки можно рассматривать как часть корректирующего канала. Как видно из таблицы, качество лучших реальных пушек приближается к приведенному пределу, но не достигает его. При этом в некоторых пушках применяется «beam shaping», т. е. продольное и / или поперечное распределение электронов в сгуст-

Таблица 1

Параметры модельных пушек

Пушка	ε_0^c	ε_h^c	I_m/I_p	φ	ε_r^c
300kvGun	0,25...0,35	0,04...0,06	0,4...0,5	2,4...2,5	0,05...0,08
150kvGun	0,25...0,35	0,03...0,05	0,37...0,45	2,0...2,1	0,04...0,06
300kvShortGun	0,3...0,4	0,04...0,07	0,56...0,67	1,9	0,1...0,2
850kvGun	0,35...0,5	0,07...0,1	0,49...0,59	2,5...2,7	0,11...0,17
300kvLongGun	0,26	0,045...0,055	0,3...0,45	3,1...3,4	0,05...0,08
300kvLongGunPl	0,3...0,5	0,06...0,08	0,11...0,13	1,6...1,8	0,02...0,025
RFGun1MV	0,2...0,35	0,037...0,06	0,022...0,067	0,6...1,0	0,017...0,023
RFGun2MV	0,2...0,35	0,037...0,065	0,02...0,08	0,6...1,1	0,018...0,022

Таблица 2

Параметры существующих пушек

Пушка	E_{kin} , МэВ	I_p , А	x_e , мм	ε_n , мм·мрад	ε^c
LCLS *	2,0	50	1	0,83	0,034
DESY	1,05	100	1	2,7	0,06
DESY *	1,05	43	0,57	1,7	0,10
BNL IV	1,33	67	0,3	1,4	0,14
BNL IV *	1,33	133	0,3	1,35	0,095
MIT	0,27	50	0,5	3,5	0,14

Таблица составлена по данным: www.ssl.slac.stanford.edu/lcls/; www.ssl.slac.stanford.edu/lcls/parameters.html; [11; 12; 13; 14; 15; 16; 17; 18]. Знаком «звездочка» отмечены пушки с «beam shaping», т. е. в которых продольное и / или поперечное распределение электронов приближено к прямоугольному.

ке приближено к прямоугольному. В этом случае эффект пространственного заряда может быть и вовсе сведен к нулю. Тем не менее остается поперечная температура фотоэлектронов. Для Cs_2Te фотокатода и длины волны излучения 262 нм эта температура была измерена в [11] – она оказалась 0,8 эВ. Если предположить, что температура фотоэлектронов с металлического (медь или магний) катода в LCLS приблизительно та же, то это ограничивает нормализованный эмиттанс сгустка [11]

$$\varepsilon_n = x_e \sqrt{\frac{2E_k}{3m_e c^2}} \cong 1 \text{ мм} \cdot \text{мрад}.$$

По-видимому, именно это ограничивает эмиттанс пушки LCLS.

Эффекты сетки

Таких эффектов можно насчитать три:

- 1) рассеяние на ячейках;
- 2) фокусировка / дефокусировка в ячейках при неоптимальном токе катода;
- 3) неоднородность заряда пучка, создаваемая ячейками.

Рассеяние на ячейках не связано с эффектом собственного заряда, но может заметно влиять на эмиттанс, и поэтому включено в рассмотрение.

Если U – напряжение катод-сетка, то нормализованный поперечный импульс определяется неравенством

$$\frac{p}{mc} < \sqrt{2 \frac{eU}{mc^2}}.$$

Число рассеянных частиц, вылетевших за пределы катодно-сеточного промежутка

$$\frac{\Delta N}{N} < \frac{d}{4l} < \frac{U}{4W\rho l},$$

где N – общее число частиц; $W \approx W_0/\beta^2 \approx W_0 mc^2/2eU$ – ионизационные потери (см. [19. Формула Бете (1.16), табл. 1.6]), $W_0 \approx 2 \text{ МэВ/г} \cdot \text{см}^2 = 2 \cdot 10^5 \text{ эВ/кг} \cdot \text{м}^2$; l – отношение площади ячейки к ее периметру. Учтено, что не более половины электронов вылетает через левую стенку и не более половины вылетевших имеют им-

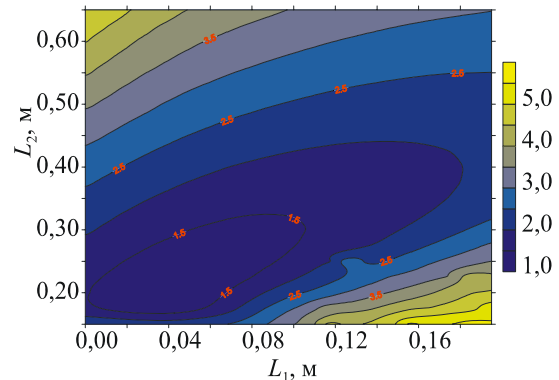


Рис. 11. Эмиттанс, мм·мрад, сгустка с пиковым током 2,2 А в зависимости от длин первого и второго участков неоднородного канала. Сила линзы оптимизирована

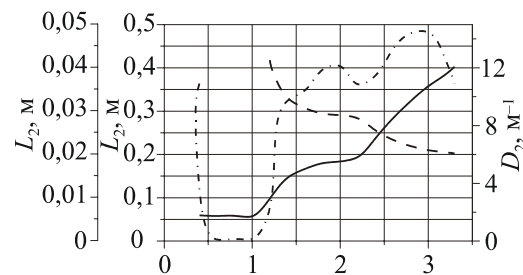


Рис. 12. Параметры оптимального неоднородного канала в зависимости от пикового тока: первый промежуток (штрихпунктир), второй промежуток (сплошная линия) и сила линзы (пунктир)

пульс, направленный вверх (от эмиттера), все же прочие за пределы сетки не вылетают. Тогда вклад от рассеяния на сетке в нормализованный эмиттанс можно оценить как

$$\varepsilon_n = \frac{pc}{mc^2} r \sqrt{\frac{\Delta N}{N}} < r \frac{eU}{mc^2} \sqrt{\frac{U}{W_0 \rho l}}.$$

Например, для катодно-сеточного узла Y-824 от СРІ (диаметр эмиттера 16 мм, расстояние катод-сетка 0,2 мм, размер квадратной ячейки 0,55 мм) при напряжении катод-сетка 100 В значение справа $\approx 2,9 \cdot 10^{-8}$ м. Повидимому, влияние рассеяния на эмиттанс не существенно.

Оценим теперь эффект (де)фокусировки в ячейках при неоптимальном токе. Рассмотрим сначала круглую ячейку с радиусом R . Пусть электрическое поле по разные стороны сетки отличается на ΔE . Тогда поток поля, уходящий на края одной ячейки,

$$\Delta \Phi = \pi R^2 \Delta E = 2\pi R \int E_R dz \Rightarrow \Rightarrow \int E_R dz = \frac{R \Delta E}{2},$$

где E_R – радиальное поле на поверхности цилиндра с радиусом R ; z – координата вдоль движения пучка. Приобретенный час-

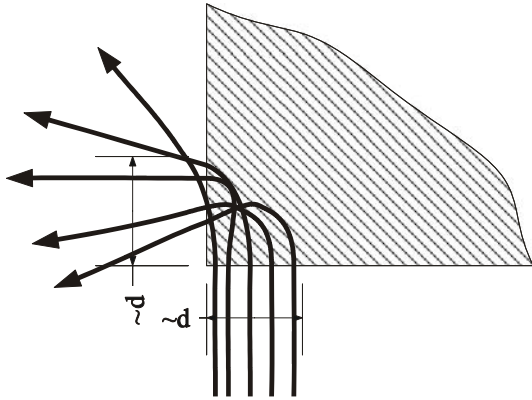


Рис. 13. Рассеяние электронов сеткой

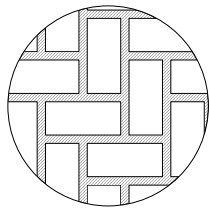


Рис. 14. «Паркетная» сетка

тицей на краю отверстия поперечный импульс

$$p = \frac{e}{v} \int E_R dz,$$

а нормализованный наклон ее траектории

$$r'_n = \frac{p}{mc} = \frac{e}{mcv} \int E_R dz = \frac{R \Delta E}{2 \sqrt{2U mc^2/e}}.$$

Учитывая, что для круглой ячейки $\langle r'^2 \rangle^{1/2} = 1/2 r'_{\max}$, можем оценить нормализованный эмиттанс от (де)фокусировки в ячейках как

$$\varepsilon_n = \sqrt{\langle r'^2 \rangle \langle r_n'^2 \rangle} = \frac{r_e \cdot R \Delta E}{8 \sqrt{2U mc^2/e}}. \quad (15)$$

Для уменьшения тепловых деформаций сетку часто делают «паркетной» (рис. 14). Ячейку такой сетки можно рассматривать с хорошей точностью как щель, имеющую бесконечную длину. В этом случае получаем оценку нормализованного эмиттанса, отличающуюся лишь коэффициентом – 3 вместо 2 под корнем в знаменателе в (15). Здесь d – ширина щели.

Для того чтобы оценить эмиттанс сгустка, нужно знать зависимость ΔE от I . E в зазоре катод-сетка растет приблизительно как $I^{2/3}$, а поле снаружи сетки – результат расчета пушки. Возьмем исходную пушку «300kVGun», будем считать, что согласованный ток ($\Delta E = 0$) равен «естественному» току пушки (в режиме ограничения тока собственным зарядом). Зависимость ΔE от I в таких предположениях приведена на рис. 15. С хорошей точностью $d\Delta E/dI \approx -0,467$ МВ/(м·А). Подставив эту линейную зависимость в (15) и усреднив квадрат эмиттанса по сгустку, найдем вклад фокусировки в ячейках сетки в эмиттанс.

Зависимость нормализованного эмиттанса, внесенного сеточными линзами, от пикового тока приведена на рис. 16. Сетка такая же, как в Y-824 СРІ.

Эмиттанс той же пушки с корректирующим каналом растет приблизительно пропорционально пиковому току в диапазоне 2...3,3 А (см. рис. 9) и составляет $\varepsilon \approx 1,05 \rightarrow \varepsilon_n \approx 1,3$ мм·мрад при 2,2 А и $\varepsilon \approx 1,64 \rightarrow \varepsilon_n \approx 2,0$ мм·мрад при 3,3 А. Видно, что сеточный эмиттанс превышает таковой от собственного заряда при любом пиковом токе сгустка. Если же корректирующий канал отсутствует, сеточный эмиттанс меньше вы-

званного собственным зарядом при пиковом токе более $\approx 1,3$ А. В остальных рассмотренных пушках ситуация аналогичная.

Из-за прореживания сеткой плотность тока в пушке становится неоднородной (рис. 17). Тогда плотность тока, прошедшего через отверстия в сетке, выше, чем средняя в слое. Считая движение слоя главной траекторией, можно рассмотреть движение участка с током как возмущение оной.

Здесь изображена простейшая одномерная картинка. На самом деле, измерений два, и области не являются концентрическими окружностями. В случае же с «паркетной» сеткой движение приблизительно соответствует одномерному планарному. До тех пор, пока края участков с током не соприкоснулись, их можно рассматривать изолированно. Далее каждая частица движется в среднем с поперечной скоростью, набранной к данному моменту, а сила, действующая на нее, осциллирует около значения, характерного для равномерно заряженного слоя. Это происходит из-за пересечения все новых и новых краев начальных участков с током и перемешивания. Если сетка квадратная, соприкосновение краев происходит не одновременно по всему периметру. Тем не менее общая картина примерно такая же.

Таким образом, на эмиттанс от данного эффекта влияют:

- 1) размер пучка x ;
- 2) локальное волновое число зарядовых колебаний $\sqrt{j}/x$;
- 3) размер ячейки χ ;
- 4) относительная амплитуда зарядовых колебаний A ;
- 5) коэффициент прозрачности сетки v .

Оценим эмиттанс от данного эффекта как

$$\varepsilon \approx x x' \approx x \cdot \chi A (1 - \sqrt{v}) \frac{\sqrt{j}}{x} \approx \frac{1}{2} \chi A (1 - v) \sqrt{j}.$$

Как обычно, подразумеваются средне-квадратичные размеры: для квадратной сетки (хорошее приближение – круглые отверстия) следует брать $\chi = 1/4 d$, а для паркетной $\chi = 1/2 \sqrt{3d}$. В последнем случае лишь половина щелей дает вклад в x' в заданном направлении, так что результат надлежит поделить на $\sqrt{2}$. В результате получаем: $\chi = 1/2 \sqrt{6d}$. Тогда приращение нормализованного эмиттанса от прореживания сеткой составит

$$\varepsilon_n \approx (0,1 \dots 0,125) A d (1 - v) \sqrt{\frac{I}{I_0 (\beta \gamma)}}.$$

Для пушек, рассмотренных в предыдущем разделе, и сетки с квадратными ячейками с периодом 0,3 мм и прозрачностью 0,8 рассматриваемый эффект дает добавку к коэффициенту качества 0,0024...0,018, причем большие значения относятся к «коротким» пушкам. Можно сделать вывод, что эффект прореживания сеткой значительно слабее, чем эффекты продольной неоднородности заряда и фокусировки сеткой.

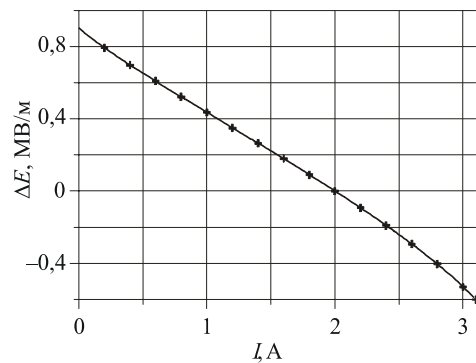


Рис. 15. Зависимость разности потенциалов по сторонам сетки от тока катода в пушке «300kVGun»

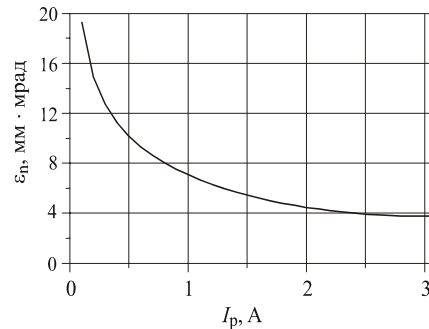


Рис. 16. Нормализованный эмиттанс, внесенный сеточными линзами, в зависимости от пикового тока. Пушка «300kVGun»

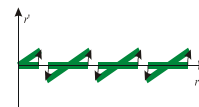


Рис. 17. Прореживание тока сеткой

Выводы

1. Оптимальный компенсирующий канал улучшает эмиттанс импульсной пушки, определяемый макроскопическим собственным зарядом, в 3...15 раз. Оптимальный канал дополняет фазу зарядовых колебаний до 2π и согласован с пучком.
2. Ожидаемый нормализованный эмиттанс пушки с коррекцией можно оценить из (14).
3. Показатели качества лучших существующих пушек приближаются к теоретической оценке.
4. Другие существенные эффекты, влияющие на эмиттанс пушек – температура фотоэлектронов или фокусировка ячейками сетки. По-видимому, именно эти эффекты определяют эмиттанс лучших существующих пушек.

Список литературы

1. *Канчинский И. М.* Теория линейных резонансных ускорителей. М.: Энергоиздат, 1982.
2. *Miginsky S. V.* Space charge effect, coherence of charge vibration and emittance. Prepr. Budker INP № 2007-11. Novosibirsk, 2007. (http://www.inp.nsk.su/activity/preprints/files/2007_011.pdf)
3. *Carlsten B. E.* New photoelectric injector design for the Los Alamos National Laboratory XUV FEL accelerator // NIM. 1989. Vol. A 285.
4. *Serafini L., Rosenzweig J.* Relativistic quasilaminar beams in RF photoinjectors: a theory of emittance compensation // Phys. Rev. 1997. Vol. E 90.
5. *Miginsky S. V.* Minimization of space charge effect // NIM. 2007. Vol. A 575.
6. *Miginsky S. V.* Optimal beamlines for beams with space charge effect // XX Russian Conf. on Charged Particle Accelerators RuPAC-2006. Novosibirsk, Russia, 2006.
7. *Miginsky S. V.* Electron guns and beamlines in the view of emittance compensation // Asian Particle Accelerator Conference APAC 2007. Indore, India, 2007.
8. *Miginsky S. V.* Coherence of space charge vibration and parameters of electron guns // 29th International Free Electron Conference FEL 2007, Budker INP. Novosibirsk, Russia, 2007.
9. *Брук Г.* Циклические ускорители заряженных частиц. М.: Атомиздат, 1970.
10. *Fomel B. M., Tiunov M. A., Yakovlev V. P.* SAM – an Interactive Code for Evaluation of Electron Guns: Prepr. Budker INP № 96-11. Novosibirsk, 1996. (http://www.inp.nsk.su/activity/preprints/oldwww/texts/p96_11.ps)
11. *Miltchev V., Abrahamyan K., Asova G. et al.* Transverse emittance measurements at the photo injector test facility at DESY Zeuthen // FEL'04. Trieste, Italy, 2004.
12. *Löhl F., Schreiber S., Castellano M. et al.* Measurements of the transverse emittance at the FLASH injector at DESY // PRST-AB 9. 2006. 092802. (<http://prst-ab.aps.org/pdf/PRSTAB/v9/i9/e092802>)
13. *Schreiber S.* Commissioning of the VUV-FEL injector at TTF // EPAC'04, Lucerne Congress Centre. Switzerland, 2004.
14. *Krasilnikov M. et al.* Characterization of the electron source at the Photo Injector Test Facility at DESY Zeuthen // FEL. Tsukuba, 2003.
15. *Yang J., Sakai F., Yanagida T. et al.* Experimental studies of photocathode RF gun with laser pulse shaping // EPAC'02. P., 2002.
16. *Brown W. J.* Low emittance electron beam production and characterization with a 17 GHz photocathode RF gun: Ph. D. Thesis // MIT. 2001. (<http://dspace.mit.edu/handle/1721.1/8287>)
17. *Trotz S. R.* Experimental Study of a 17 GHz High Gradient Photocathode Injector: Ph. D. thesis // MIT. 1997.
18. *Brown W. J., Trotz S., Kreischer K. E. et al.* Experimental and theoretical investigations of a 17 GHz RF gun // NIM. 1999. Vol. A425. P. 441–459.
19. *Козлов В. Ф.* Справочник по радиационной безопасности. М.: Атомиздат, 1977.

Материал поступил в редколлегию 16.10.2007

Л. А. БоярскийИнститут неорганической химии СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, РоссияНовосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: boy@che.nsk.su

**ПСЕВДОЩЕЛЕВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ,
ЩЕЛЬ И ПСЕВДОЩЕЛЬ В СИСТЕМАХ С ВОЛНАМИ
СПИНОВОЙ / ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ.
ОБЩИЙ ПОДХОД И ПРИМЕНИМОСТЬ ДВУХЖИДКОСТНОЙ МОДЕЛИ ***

Рассмотрены экспериментальные данные, касающиеся магнитных, электрических и гальваномагнитных свойств d - и f -металлов и их разбавленных сплавов, низкоразмерных проводников, а также высокотемпературных сверхпроводников. Сформулирован общий подход к описанию ряда явлений в сильно коррелированных электронных системах. Эти явления объединяет, с одной стороны, флуктуационная природа эффектов, с другой – наличие (или возникновение) неоднородной зарядовой и / или спиновой плотности. С этими особенностями связаны характерные аномалии в электронных спектрах – появление неоднородных щелей и псевдощелей. Проведенный анализ позволил сформулировать гипотезу о применимости двухжидкостной модели, а также модели виртуальных уровней Фриделя, для интерпретации результатов.

Ключевые слова: особенности электронных спектров, сверхпроводники и магнетики, двухжидкостная модель.

**Высокотемпературные
сверхпроводники и не только**

В электропроводящих системах при фазовых переходах различной природы (сверхпроводящие, магнитные и т. п.) наблюдаются изменения электронных спектров. Речь идет, в первую очередь, о появлении щелей, анизотропных щелей, псевдощелей вблизи поверхности Ферми. Из самых общих соображений следует, что определенная часть носителей заряда перестает принимать участие в «рутинных» процессах электропроводности. Следует заметить, что далеко не во всех случаях «судьба» упомянутых носителей становится предметом обсуждения. Строгая картина имеет место в случае классических сверхпроводников, для которых щель в спектре, возникающая при фазовом переходе, связывается с бозе-конденсацией куперовских пар. К тому же, насколько известно, никакой другой щели в данном случае не обнаруже-

но. В высокотемпературных сверхпроводниках – купратах, на фазовой диаграмме выше границы сверхпроводящей фазы имеется область температур отвечающей металлической проводимости с пониженной концентрацией носителей (псевдощель). Следует заметить, что построение фазовой диаграммы высокотемпературных сверхпроводников – задача не вполне однозначная, в литературе встречаются различные версии соответствующих картинок. Это, возможно, связано как с различным химизмом объектов (иттриевые, висмутовые, таллиевые, лантановые сверхпроводники и т. п.), так и с различными подходами к интерпретации экспериментальных результатов. Как следствие, несмотря на то что существование псевдощели было обнаружено достаточно давно, этот феномен интенсивно обсуждается в литературе до сих пор. Факт существования особенности в электронном спектре не вызывает сомнений. Однако по поводу ме-

* Работа выполнена при финансовой поддержке Интеграционной программы СО РАН (грант 81) и доложена на 5 семинаре по сверхпроводимости и смежным проблемам в г. Красноярске (сентябрь 2007 г.).

ханизма «ухода» носителей заряда из зоны проводимости существуют две противоречащие друг другу точки зрения. Одна из них заключается в сохранении выше температуры сверхпроводящего перехода некоторого количества некоррелированных куперовских пар (в каком-то смысле аналог областей ближнего порядка выше точки Кюри в ферромагнетиках), другой подход апеллирует к сохранению антиферромагнитных кластеров как «следов» антиферромагнитного упорядочения диэлектрической фазы при низком содержании кислорода. Эта, вторая, точка зрения находит достаточно убедительное экспериментальное подтверждение, да и теоретические подходы разработаны весьма подробно. В рамках этой модели сделан вывод, что электроны образуют динамические связанные квазилокализованные состояния (восходящие к идеям Фриделя о виртуальных уровнях). Библиографию и краткое изложение теоретических моделей можно найти в наших предыдущих публикациях [1; 2]. С современными публикациями можно познакомиться, например, в обзорах [3; 4] и работе [5].

Казалось бы вопрос можно считать исчерпанным. Однако не все так просто. Если принять во внимание сведения, почерпнутые из разных литературных источников, то можно заключить, что на фазовой диаграмме между «сверхпроводящим колоколом» и областью нормального металла существуют три участка. В непосредственной близости от T_c должна существовать флуктуационная область, содержащая куперовские пары (рис. 1).

Флуктуации амплитуды параметра порядка ответственны за такие явления, как избыточная проводимость, а также эффект Нернста – генерации поперечного электрического поля при наличии продольного градиента температуры. Экспериментально этот эффект был подтвержден в опытах на аморфных пленках системы Nb – Si [6], а также на пленочных образцах празеодим-цериевого купрата [7]. Далее, вплоть до кривой $T^*(x)$, где x – содержание кислорода, существует так называемая «сильная» псевдощель, а при более высокой температуре есть еще область «слабой» псевдощели. При этом псевдощелевые области, возможно, отличаются по своей природе.

В этой связи целесообразно рассмотреть результаты работы, выполненной совсем не-

давно [8]. Авторы просканировали поверхности скола монокристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ иглой СТМ при точности фиксации последней не хуже 0,1 Å. Были исследованы монокристаллы с различным содержанием кислорода – недодопированные, оптимально допированные и передопированные. Анализ дифференциальных вольт-амперных характеристик позволил определить температурные зависимости величины щели в разных участках образца. Оказалось, что в оптимально и передопированных образцах «пятна» щели наблюдаются выше температуры сверхпроводящего перехода, что интерпретируется как кластеры некоррелированных пар. Высказано предположение, что наблюдаемый результат связан с локальными понижениями температуры соответствующих участков. Именно такую «генетику» мягкой псевдощели выдвигают авторы в качестве основной гипотезы. Поскольку в недодопированных образцах подобное явление не наблюдалось, авторы утверждают, что природа сильной псевдощели лежит в другой области представлений. Нельзя не заметить, что версия о неоднородном распределении температуры по образцу недостаточно убедительна.

Совершенно иной результат был получен в работе, выполненной на образцах лантановой системы [9]. Использование метода неупругого рассеяния нейтронов позволило авторам работы заключить, что и в передопированных образцах сохраняются динамические антиферромагнитные кластеры. Связано ли это с особенностями лантановой системы и ее отличиями от висмутовых высокотемпературных сверхпроводников, изученных в цитируемой выше работе, остается неизвестным.

В совсем недавно появившейся работе китайского теоретика Као [10] утверждается, что флуктуационная область вблизи точки сверхпроводящего перехода (область Нернста) описывается d - p спариванием, а в области сильной псевдощели мы имеем дело с p - p спариванием. Последний результат, на наш взгляд, противоречит экспериментальным данным.

Все рассуждения, касающиеся щелей и псевдощелей, напрямую связаны с вопросом о форме поверхности Ферми. В купратных сверхпроводниках поверхностью Ферми обычно считают ее проекцию на плоскость a - b , параллельную слоям дуо-

киси меди. Фактически это не поверхность, а контур Ферми. Указанный контур экспериментально установлен для передопированных составов – это замкнутая кривая без разрывов (рис. 2) [11. С. 3], что согласуется с теоретическими расчетами. Для недодопированных составов до сих пор имеются значительные расхождения в результатах. Более или менее общая точка зрения, основанная на данных ARPES, состоит в том, что при уменьшении концентрации носителей упомянутая замкнутая кривая разбивается на отдельные, не связанные друг с другом участки (так называемые фермиевские дуги). Обычно этот результат относят на счет возникновения анизотропной псевдощели.

В работе [12] представлены результаты исследования совершенных иттриевых монокристаллов с содержанием кислорода 6,5 методом измерения осцилляций холловского сопротивления как функции магнитного поля $1/H$ в импульсных полях до 60 Тл. Осцилляции наблюдались при температурах ниже 7,5 К. По частоте осцилляций и их температурной зависимости были определены эффективная масса электрона, оказавшаяся превосходящей массу свободного электрона в два раза, а также площадь двумерной «поверхности Ферми» в импульсном пространстве, составившая лишь около 2 % от зоны Бриллюэна и около 3 % от площади поверхности Ферми в передопированном купрате. По мнению авторов, поверхность Ферми в иттриевом кристалле представляет собой четыре «кармана», которые при исследовании фотоэмиссионных спектров были приняты за фермиевские дуги.

Из всего описанного следует по крайней мере один неоспоримый факт: экспериментально наблюдаемые особенности спектров свидетельствуют о том, что определенная доля электронов «исчезает» из зоны проводимости. Адрес же этого исчезновения составляет предмет многочисленных исследований, но в данном контексте не так уж принципиален.

Важно другое. Родственные явления – возникновение щелей и псевдощелей в энергетических спектрах – наблюдаются в веществах, с одной стороны, никакого отношения к сверхпроводимости не имеющих, и, с другой стороны, достаточно простых по составу. Ранее [1; 2] мы уже описывали результаты исследования сплавов Cr–V. В этих сплавах

при сравнительно небольшой примеси ванадия антиферромагнитное состояние в хrome разрушалось, однако в электронном спектре наблюдалась псевдощель.

Следует заметить, что антиферромагнитная структура хрома представляет собой систему стоячих волн спиновой плотности. Естественным образом вблизи поверхности Ферми имеется анизотропная щель, т. е. часть $3d$ -носителей «выключена» из участия

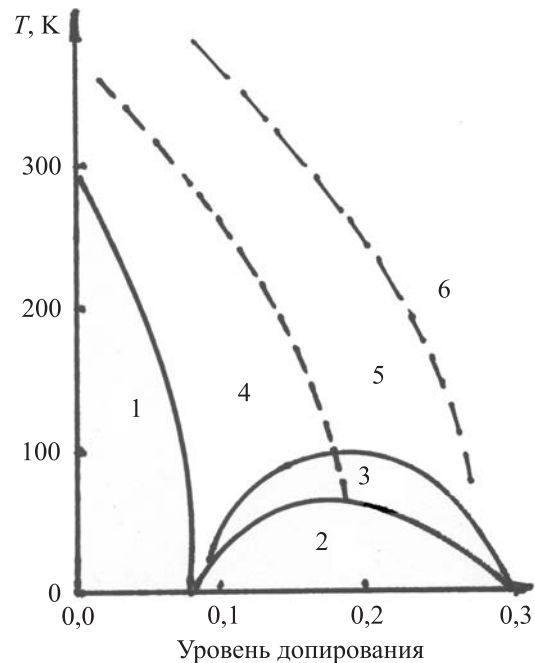


Рис. 1. Фазовая диаграмма купрата: 1 – область антиферромагнетизма; 2 – сверхпроводящее состояние; 3 – область сверхпроводящих флуктуаций; 4 – область «сильной» псевдощели; 5 – область «слабой» псевдощели; 6 – нормальный металл

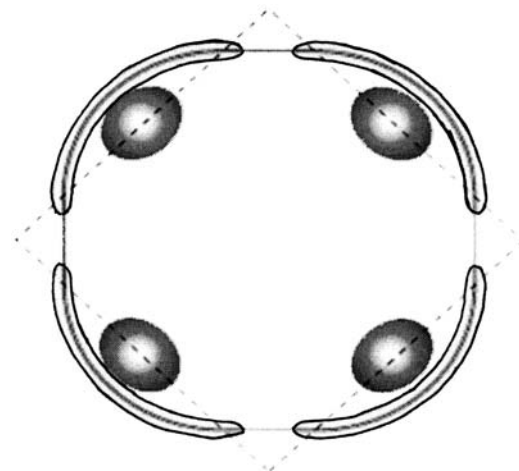


Рис. 2. Поверхность Ферми в передопированных (сплошная линия) и недодопированных (четыре «пятна») купратах. Отдельно показаны фермиевские дуги. Пунктирная линия соединяет точки $(k_x, k_y) = (\pm \pi, 0)$ и $(0 \pm \pi)$ в двумерной зоне Бриллюэна

в «рутинных» процессах электропроводности. Выше точки Нееля щель исчезает, что отражается в аномалии электросопротивления. Подобное поведение наблюдается и в других *d*-магнетиках.

Существует также класс веществ, для которых характерно существование волн зарядовой плотности. И здесь наблюдается появление псевдощели. В предыдущих работах [1; 2] мы приводили пример такого квазиодномерного соединения. Характерно, что в этом и других подобных случаях мы имеем дело с веществами пониженной размерности. В работе [13], к примеру, исследуется псевдощелевой эффект в низкоразмерном биселениде таллия.

Нельзя не упомянуть еще одну, появившуюся совсем недавно, работу [14]. Здесь на температурной зависимости спектров оптической проводимости в $\text{Ca}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ ниже 50 К найдена псевдощель, связанная с образованием волн зарядовой плотности. Не исключено, что обнаруженное явление связано с сильной гибридизацией различных орбитальных состояний, что, в свою очередь, обусловлено большими структурными искажениями, приводящими к нестабильностям в системе волн плотности, а также к орбитальным возбуждениям.

Хорошо известен еще один класс веществ, свойства которых тесно связаны с особенностями электронных спектров. Речь идет о спиновых стеклах – разбавленных сплавах нормальных металлов с небольшими примесями переходных металлов. Для описания свойств таких сплавов (в первую очередь особенностей магнитных и электрических характеристик) Ж. Фриделем была предложена модель виртуальных электронных уровней. Согласно этой модели вокруг атомов примеси образуются области повышенной электронной плотности (естественно, за счет электронов матрицы). Эти области становятся дополнительными центрами рассеяния, а также суперпарамагнитными кластерами. Для нас важно другое – некоторая доля носителей заряда уходит из «регулярной» деятельности электропроводного вещества, что отражается в появлении щели (или псевдощели) в спектре.

Об электронных свойствах редкоземельных металлов

Для всех систем, затронутых выше, характерно участие в рассматриваемых процес-

сах электронов *d*-оболочек. Эти электроны, как известно, образуют зону проводимости и тесно взаимодействуют с *s*-электронами. Следует напомнить, что высокотемпературная сверхпроводимость связана с ионами двухвалентной меди. Несколько более сложную систему представляют собой редкоземельные металлы, магнетизм которых определяется моментами незаполненных «внутренних» *4f*-оболочек. Необходимое для организации магнитупорядоченных состояний взаимодействие осуществляется благодаря механизму косвенного обмена через электроны проводимости (взаимодействие Рудермана – Киттеля – Касуя – Йошида, или РККИ). Антиферромагнитные редкие земли характеризуются длиннопериодными магнитными структурами, периоды которых в общем случае несоизмеримы с длинами кристаллографических осей. Магнитный фазовый переход приводит к появлению в электронном спектре энергетической щели, что свидетельствует, на наш взгляд, о том, что доля электронов проводимости, участвующая во взаимодействии РККИ, образует в валентной зоне систему виртуальных уровней. Иными словами, и в этом случае мы наблюдаем определенное разделение функций электронов проводимости.

Как хорошо известно из экспериментов по рентгеновской и нейтронной дифракции, при изменении температуры магнитные и решеточные периоды изменяются неодинаково, при этом может оказаться энергетически выгодным переход в соизмеримую фазу (*lock-in* переход), т. е. фазу, в которой указанные периоды относятся друг к другу как целые числа. Таких точек, вообще говоря, может быть бесконечное множество, однако на опыте удастся наблюдать, в зависимости от совершенства испытуемого кристалла, сравнительно малое количество точек соизмеримости, когда соотношение периодов выражается небольшими числами.

Экспериментально точки перехода в соизмеримую фазу фиксируются по измерениям магнитной восприимчивости, электросопротивления, теплоемкости, а также в опытах по структурному и нейтронографическому анализам [15–19]. Основные результаты как в нашей стране, так и за рубежом, были получены на монокристаллических образцах гольмия и эрбия. С подробностями можно

ознакомиться в цитированных работах, здесь же следует подчеркнуть, что переход соизмеримость – несоизмеримость идентифицируется как фазовый переход первого рода.

Рассмотрим предложенную нами ранее микроскопическую картину явлений, происходящих вблизи точек соизмеримости [20; 21]. Здесь просматривается прямая связь между аномалиями физических свойств и особенностями поверхности Ферми тяжелых РЗМ, кристаллизующихся в гексагональной решетке [22; 23].

Поверхность эта (рис. 3) имеет квазицилиндрическую форму с перпендикулярными отростками («рукавами») цилиндрической же формы вблизи симметричных точек L в зоне Бриллюэна парамагнитного кристалла [24]. На рукавах имеются параллельные участки, что вызывает рост фурье-компонент электрической, магнитной восприимчивости и обменного интеграла с волновым вектором $\mathbf{Q}$, близким к толщине рукавов $\Delta k \sim 0,5\pi/c$, где c – период решетки вдоль гексагональной оси. С этим связывается возникновение основной гармоники магнитной структуры, волновой вектор которой $\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}$ параллелен гексагональной оси, а плоскости разрыва энергии $\mathbf{k} \cdot \frac{1}{2}(m\mathbf{G} + n\mathbf{q})$, где m и n – целые числа, а $\mathbf{G}$ – вектор обратной решетки кристалла, образуют горизонтальные сечения поверхности Ферми. При изменении $\mathbf{q}$ щели магнитной сверхрешетки сливаются между собой или с основной щелью на границе зоны Бриллюэна. Наиболее существенным оказывается изменение топологии поверхности Ферми вблизи горизонтальных участков на рукавах, ответственных, как отмечено выше, за пик электронной восприимчивости и возникновение основной гармоники магнитной структуры. Моделирование упомянутых эффектов было проведено с использованием некоторой приближенной формы рукавов. Вблизи точки соизмеримости вследствие слияния микрощели с основной щелью кристалла, возникают особенности в поведении температурных зависимостей волнового вектора, магнитного момента и электросопротивления. В частности, увеличение эффективной площади параллельных участков на поверхности Ферми вызывает рост магнитной восприимчивости, наблюдаемый на опыте. Обменная поляризация электронов проводимости магнитными ионами приводит также к аномалиям сверхтонкого поля на примеси.

Таким образом, перестройка электронного спектра в точках соизмеримости магнитных и решеточных периодов, выражающаяся в изменении структуры энергетических щелей вблизи поверхности Ферми, проявляется во многих экспериментально наблюдаемых свойствах вещества.

Заключение

Из всего изложенного видно, что вне зависимости от характера фазового перехода вблизи особых точек наблюдаются аномалии в электронном спектре, возникающие особенности интерпретируются как появление щелей, какая-то доля носителей заряда исключается из участия в процессах переноса. Механизмы при этом могут быть самыми различными – куперовское спаривание, суперпарамагнитные или антиферромагнитные кластеры, образование стоячих волн спиновой или зарядовой плотности, участие во взаимодействии РККИ, приводящее к образованию виртуальных квазилокализованных состояний и т. д.

На протяжении ряда лет, выступая на различных конференциях, Сергей Васильевич Вонсовский часто использовал термин «электронное хозяйство металла». Термин касался, главным образом, зонной структуры и особенностей поверхности Ферми. Однако, на наш взгляд, этот термин имеет и расширительный смысл. Имеется в виду, что во всяком обустроенном хозяйстве практикуется разделение труда и обя-

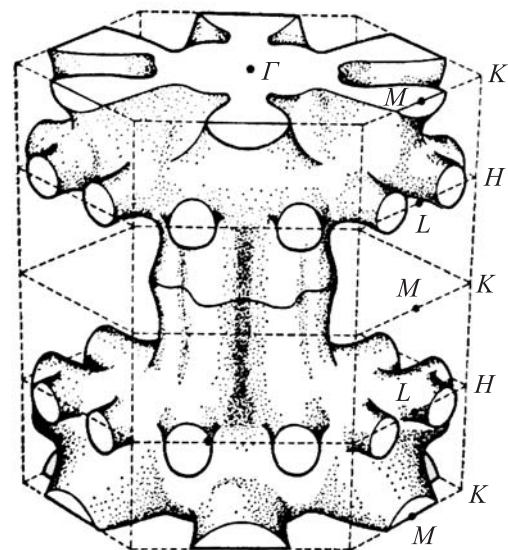


Рис. 3. Поверхность Ферми эрбия

занных. Из приведенных нами примеров следует, что разные группы электронов в одном и том же веществе могут выполнять различные функции. Естественно, что это «разделение труда» имеет виртуальный характер, поскольку на электроны невозможно навесить ярлык с наименованием рода занятий.

Для интерпретации всего комплекса затронутых явлений, на наш взгляд, уместно использовать хорошо известную двухжидкостную модель Гортера – Казимира, предложенную в свое время для объяснения зависимости критического магнитного поля сверхпроводников 1-го рода от температуры. Позднее эта модель была с успехом применена для описания многочисленных экспериментов в сверхтекучем гелии. В нашем случае возможность использования двухжидкостной модели не вызывает сомнений. Действительно, в подавляющем большинстве описанных экспериментов наблюдаются характерные температурные зависимости значений щелей (псевдощелей), да и все другие параметры систем не противоречат указанной теоретической концепции. Пожалуй, только в случае анализа эффектов соизмеримости в редких землях мы сталкиваемся с определенными сложностями. Очевидно, что это связано, в первую очередь, с существенной узостью температурных интервалов, в которых наблюдаются соответствующие эффекты.

Подытоживая представленные результаты и выводы из них, следует подчеркнуть, что двухжидкостная модель обладает высокой степенью общности, что позволяет в ее рамках интерпретировать многочисленные явления в проводящих сильно коррелированных системах. Что же касается кинетики образования упомянутых двух компонентов «электронного хозяйства» вещества, то наиболее вероятным механизмом, на наш взгляд, можно считать образование фриделевских виртуальных уровней.

Список литературы

1. Боярский Л. А. Псевдощелевые эффекты в сильно коррелированных электронных системах // Физика низких температур. 2006. Т. 32, № 8/9. С. 1078–1084.
2. Боярский Л. А. Псевдощелевые аномалии в спектрах сильно коррелированных

электронных систем (магнетики и сверхпроводники) // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2006. Т. 1, вып. 2. С. 105–112.

3. Lee P. A., Nagaosa N., Wen X.-G. Doping a mott insulator: physics of high-temperature superconductivity // Rev. Mod. Phys. 2006. Vol. 78. P. 17–85.

4. Lee P. A. From high temperature superconductivity to quantum spin liquid: progress in strong correlated physics // Cond-mat. 2007. 0708.2115. 22 p.

5. Kuchinskii E. Z., Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V. et al. Pseudogap behaviour in Bi2212: results of generalized DMFT approach // Cond-mat. 2006. 0606651.

6. Pourret A., Aubin H., Lesueur J. et al. Observation of the Nernst signal generated by fluctuating Cooper pairs // Cond-mat. 2006. 0607587. 15 p.

7. Li Pengcheng, Greene R. L. Normal state Nernst effect in electron-doped $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$: superconducting fluctuations and two-band transport // Cond-mat. 2007. 0708.1018v2. 9 p.

8. Gomes K. K., Pasupathy A. N., Pushp A. et al. Visualizing pair formation on the atomic scale in the high- T_c superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // Nature. 2007. Vol. 447. P. 569–572.

9. Lipscombe O. J., Hayden S. M., Vignolle B. et al. Persistence of high-frequency spin fluctuations in overdoped superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x = 0,22$) // PRL. 2007. Vol. 99. 067002.

10. Cao T. D. Strong correlations and phonons induced two kinds of pairs // Cond-mat. 2007. 0708.3142. 3 p.

11. Опенов Л. Какая поверхность Ферми в ВТСП? // ПерсТ. 2007. Т. 14, вып. 14/15.

12. Doiron-Leyraud N., Proust C., LeBoeuf D. et al. Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor // Nature. 2007. Vol. 447. P. 565–568.

13. Borisenko S. V., Kordyuk A. A., Yaresko A. N. et al. Pseudogap and charge density waves in two dimensions // Cond-mat. 2007. 0704.1544. 14 p.

14. Lee J. S., Moon S. J., Yang B. J. et al. Pseudogap dependence of the optical conductivity spectra of $\text{Ca}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$: a possible contribution of the orbital flip excitation // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 98. 097403.

15. Блинов А. Г., Боярский Л. А., Савицкий Е. М. и др. Электросопротивление антиферромагнитного эрбия // ФТТ. 1983. Т. 25. С. 980–985.

16. Блинов А. Г., Боярский Л. А., Кольчугина Н. Б. и др. Неоднородные состояния и магнитные превращения в монокристалле эрбия // Неоднородные электронные состояния: Сб. ст. Новосибирск, 1984. Т. 1. С. 50–51.
17. Березовский Г. А., Боярский Л. А., Казаков А. М. и др. Аномалии теплоемкости монокристаллического эрбия // Неоднородные электронные состояния: Сб. ст. Новосибирск, 1984. Т. 1. С. 52–53.
18. Березовский Г. А., Блинов А. Г., Боярский Л. А. и др. Видоизменения антиферромагнитных структур в монокристаллическом эрбии // Высокочистые и монокристаллические металлические материалы / Отв. ред. А. И. Манохин. М.: Наука, 1987. С. 141–145.
19. Gibbs D., Moncton D. E., D'Amico K. L. *et al.* Magnetic X-ray scattering studies of holmium using synchrotron radiation // Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 55. P. 234–237.
20. Боярский Л. А., Пейсахович Ю. Г. Аномалии кинетических характеристик и сверхтонкого поля в тяжелых редкоземельных металлах, обусловленные эффектами соизмеримости // Материалы II Всесоюзного совещания по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий. М.: Изд-во МГУ, 1988. С. 49–55.
21. Boyarsky L. A. Commensurability effects and electronic structures of heavy Rare Earth Metals // Physica B. 1990. Vol. 165–166, P. 245–246.
22. Elliott R. J., Wedgwood F. A. Theory of the resistance of the rare earth metals // Proc. Phys. Soc. 1963. Vol. 81. P. 846–855.
23. Elliot R. J., Wedgwood F. A. The temperature dependence of magnetizing ordering in the heavy rare earth metals // Proc. Phys. Soc. 1964. Vol. 84. P. 63–75.
24. Крэnell А., Уонг К. Поверхность Ферми // М.: Атомиздат. 1978.

Материал поступил в редколлегию 16.10.2007

Журнал «Вестник НГУ», серия «Физика», публикует обзорные, оригинальные и дискуссионные статьи, посвященные научным исследованиям и методике преподавания физики в различных разделах науки, соответствующих направлениям подготовки на кафедрах физического факультета НГУ. Журнал издается на русском языке.

1. Очередность публикации статей определяется их готовностью к печати. Статьи, оформленные без соблюдения правил, к рассмотрению не принимаются.

Вне очереди печатаются краткие сообщения (не более четырех журнальных страниц), требующие срочной публикации и содержащие принципиально новые результаты научных исследований, проводимых в рамках тематики журнала.

Рекламные материалы публикуются при наличии гарантии оплаты, устанавливаемой по соглашению сторон.

2. В журнале печатаются результаты, ранее не опубликованные и не предназначенные к одновременной публикации в других изданиях. Публикация не должна нарушить авторского права других лиц или организаций.

Направляя свою рукопись в редакцию, авторы автоматически передают учредителям и редколлегии права на издание данной статьи на русском языке и на ее распространение в России и за рубежом. При этом за авторами сохраняются все права как собственников данной рукописи. В частности, согласно международным соглашениям о передаче авторских прав за авторами остается право копировать опубликованную статью или ее часть для их собственного использования и распространения внутри учреждений, сотрудниками которых они являются. Копии, сделанные с соблюдением этих условий, должны сохранять знак авторского права, который появился в оригинальной опубликованной работе. Кроме того, авторы имеют право повторно использовать весь этот материал целиком или частично в компиляциях своих собственных работ или в учебниках, авторами которых они являются. В этих случаях достаточно включить полную ссылку на первоначально опубликованную статью.

3. К статье прилагаются письмо от учреждения, в котором выполнена работа, и экспертное заключение о возможности ее опубликования в открытой печати. Если коллектив

авторов включает сотрудников различных учреждений, необходимо представить направления от всех учреждений.

Сообщения, основанные на работах, выполненных в учреждении (учреждениях), должны содержать точное название и адрес учреждения (учреждений), публикуемые в статье.

Статья обязательно должна быть подписана автором, а при наличии нескольких авторов – всеми соавторами. На отдельном листе указываются следующие сведения об авторах: фамилия, имя, отчество, ученые степень и звание, место работы, служебный и домашний адреса и телефоны, адрес электронной почты (для оперативной связи).

4. После подготовки статьи к печати редакция выставляет электронную версию статьи на сайте физического факультета НГУ (<http://www.phys.nsu.ru>) и извещает об этом автора с просьбой срочно сообщить в редакцию электронной почтой о замеченных опечатках для внесения исправлений в печатный текст.

5. Авторам предлагается посылать свои сообщения в наиболее сжатой форме, совместимой с ясностью изложения, в совершенно обработанном и окончательном виде, предпочтительно без формул и выкладок промежуточного характера и громоздких математических выражений. Не следует повторять в подписях к рисункам пояснений, уже содержащихся в тексте статьи, а также представлять одни и те же результаты и в виде таблиц, и в виде графиков. Рукопись статьи, объем которой должен быть логически оправданным, печатается на принтере на одной стороне стандартного (формат А4) листа белой бумаги. Рекомендуется не превышать объем присылаемых материалов: для обзорных статей – 30 страниц, оригинальных материалов – 15, кратких сообщений – 6. Все материалы рукописи статьи представляются в редакцию в двух экземплярах. К рукописи обязательно прилагается электронная версия статьи (как правило, в форматах MS WORD – *.doc или *.rtf) на дискете, лазерном диске, или пересылается в редакцию электронной почтой. При этом тексты рукописи в бумажной и электронной версиях должны быть идентичными. Допускается предоставление электронных копий рукописей в формате LATEX (соответствующий образец (template) вскоре будет помещен на сайте журнала). В этом случае рукопись будет пре-

образована редакцией в формат MS WORD, что может привести к увеличению времени обработки рукописи. Сокращений слов, кроме стандартных, применять нельзя. Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. При отправке файлов по электронной почте просим придерживаться следующих правил:

- указывать в поле subject (тема) название, номер журнала и фамилию автора;
- использовать attach (присоединение);
- в случае больших объемов информации возможно использование общеизвестных архиваторов (ARJ, ZIP, RAR);
- в состав электронной версии статьи должны входить: файл, содержащий текст статьи, и файл(ы), содержащий(е) иллюстрации.

Автор вставляет рисунки и таблицы в текст статьи так, как считает нужным. Кроме того, к экземплярам бумажного варианта статьи прилагаются таблицы, рисунки и подписи к ним на отдельных страницах. Электронная версия состоит из файла с текстом статьи и отдельных файлов с рисунками.

6. В начале статьи должны быть указаны индекс УДК, инициалы и фамилии авторов, название учреждений, в которых выполнена работа, и их почтовый адрес, название статьи, аннотация, содержащая основные результаты и выводы работы (5–7 предложений), ключевые слова (не более 10).

7. Параметры страницы: формат – А4; ориентация – книжная; поля (см): внутри – 2,8; снаружи – 2,7; сверху – 2,5; снизу – 2,3; от края до нижнего колонтитула – 1,3.

8. Основной текст: стиль – «Обычный»: гарнитура (шрифт) Times New Roman (Сур), кегль (размер) 12 пунктов, абзацный отступ 0,5 см, через 1,5 интервала, выравнивание – по ширине.

В тексте статьи следует избегать аббревиатур, даже таких общепринятых, как ЭДС, ВТСП и т. п. Использование аббревиатур и простых химических формул в заголовках статей совершенно недопустимо. Следует писать: высокотемпературная сверхпроводимость, кремний, арсенид галлия и т. п., давая при необходимости соответствующую химическую формулу в тексте. Исключение могут составлять формулы сложных химических соединений. Каждое первое употребление аббревиатуры в тексте должно быть четко пояснено.

Не следует:

- производить табуляцию;
- разделять абзацы пустой строкой;

– использовать макросы, сохранять текст в виде шаблона и с установкой «только для чтения»;

– расставлять принудительные переносы.

9. Таблицы должны быть напечатаны на отдельных страницах и иметь заголовки. В таблицах обязательно указываются единицы измерения величин.

10. Рисунки, число которых должно быть логически оправданным, четко выполняются на качественном принтере. К бумажному варианту статьи должны прилагаться рисунки на отдельных листах. На обороте каждого рисунка указываются его порядковый номер, фамилии авторов и название статьи. Подписи к рисункам оформляются также на отдельной странице. Следует использовать минимальное количество рисунков с ограниченным количеством деталей. Размер рисунка не должен быть больше обычной страницы (А4).

Фотоиллюстрации (после сканирования или с цифрового фотоаппарата) представляются в формате TIFF с разрешением не менее 300 dpi.

Векторные изображения (схемы, диаграммы, рисунки) создаются, как правило, в формате CorelDraw версий 6 ÷ 12 (*.CDR) или Adobe Illustrator версий 7 ÷ 8 (*.AI) (текст не переводить в кривые), размер изображения по ширине до 8 см (если изображение получается мелким и неудобочитаемым – ширина 15,5 см, изображение поместить на всю ширину страницы). Толщина линий не должна быть менее 0,2 мм.

Растровые (полутонные) изображения – форматы TIFF или GIF для черно-белых и серых (фото) изображений, JPEG для полноцветных изображений. Разрешение – не менее 300 dpi. Если на изображениях имеется текст или резкие границы между цветами, предпочтительнее использовать формат TIFF. При подготовке рисунка в Photoshop просим Вас **оставить текст, накладываемый на изображение, в отдельном слое**.

Просим Вас **не изменять исходный электронный формат** создаваемого Вами графического объекта.

Файлы изображений при компоновке статьи должны находиться в том же каталоге, что и основной документ и иметь имена, соответствующие номерам рисунков в статье (например, 09.tif или 22a.jpg).

11. Подписи к рисункам в электронной версии статьи выполняются под рисунками,

форматирование по центру, отступ до и после абзаца – 3 пункта, точка в конце не ставится.

Если имеется несколько рисунков, объединенных одной подписью, они обозначаются русскими буквами а, б, в и т. д.

Просим Вас не включать подписуючую подпись в поле графического объекта.

12. Формулы набираются в редакторе формул Microsoft Equation Math Type в подбор к тексту или отдельной строкой по центру, 11 кеглем. Латинские символы набираются курсивом, греческие – прямым шрифтом.

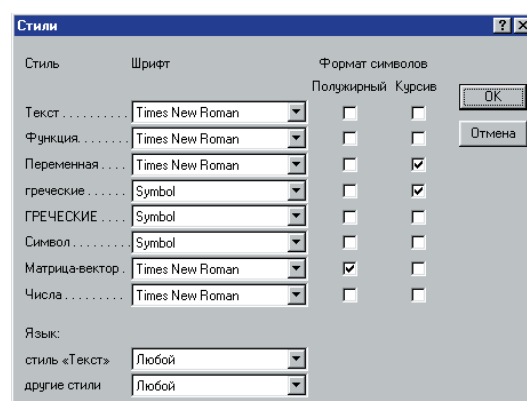
Нумерация формул сквозная, в круглых скобках, прижатых к правому краю. Нумеровать следует только те формулы, на которые есть ссылки в тексте.

13. Библиографические ссылки. В тексте в квадратных скобках арабскими цифрами указывается порядковый номер научного труда в библиографическом списке, например: [2; 3], [4–6] и т. д. В конце статьи помещается список литературы в порядке упоминания в статье. Ссылки на российские издания приводятся на русском языке вне зависимости от наличия их перевода на иностранный язык. Библиографическое описание публикации включает: фамилию и инициалы автора, полное название работы, а также издания, в котором опубликована (для статей), город, название издательства или издающей организации, год издания, том (для многотомных изданий), номер, выпуск (для периодических изданий), объем публикации (количество страниц – для монографии, первая и последняя страницы – для статьи).

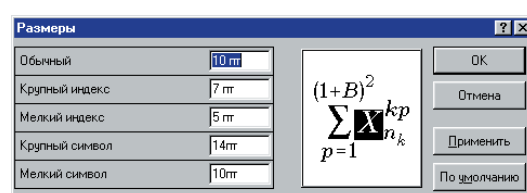
Описание статей, опубликованных в периодической печати (журналы, сборники, бюллетени и др.) оформляется следующим образом (для русского и английского текста).

Принятые сокращения городов: Москва – М.; Санкт-Петербург – СПб.; Петербург (до 1914 г.) – Пб.; Ленинград – Л.; Ростов-на-Дону – Ростов н/Д.; Нижний Новгород – Н. Новгород. Все остальные названия городов на территории бывшего Советского Союза пишутся полностью. Издательские фирмы, имеющие дочерние предприятия в других городах, при описании отделяются друг от друга точкой с запятой. Например: М.; Л. или Самара; Саратов и т. д. При написании издательств кавычки не употребляются, сокращаются названия бывших издательств, современные пишутся полностью. Перед названием отделения или филиала (после названия издательства) – точка. Например: Л.: Просвещение. Ленингр.

Example Equation



а



б

Рис. 1. Настройки редактора формул

отд-ние, 1991. При ссылке на книгу, монографию, справочник приводится общее количество страниц; при ссылке на статьи, разделы изданий – интервал номеров страниц.

14. Примеры библиографических описаний:

Одного, двух или трех авторов

Захарьевский А. Н. Интерферометры. М.: ГИОП, 1952. 296 с.

Павельев А. В. Селекция мод лазерного излучения // Методы компьютерной оптики / Под ред. В. А. Сойфера. М.: Физматлит, 2000. Гл. 6.

Raymond N. Smart Zone Plate Interferometer // Applied Optics. 1974. Vol. 13. No. 5. P. 1093–1099.

Брагинский А. В., Степанов А. И. Статистическая физика макромолекул // Тр. ФТИАН. Проблемы микроэлектронной технологии. М.: Наука, 1994. Т. 8. С. 333–342.

Коробейчиков Н. Г., Зарвин А. Е., Мадирбаев В. Ж. Газодинамика импульсных сверхзвуковых недорасширенных струй: пространственно-временные характеристики // ЖТФ. 2004. Т. 74, вып. 8. С. 21–29.

Четырех и более авторов

Korobeishchikov N. G., Zarvin A. E., Madirbaev V. Zh. et al. Condensation of argon, mono-

silane and their mixtures in a pulse free jet // Plasma Chemistry and Plasma Processing. 2005. Vol. 25. No. 4. P. 319–349.

15. В конце статьи авторы могут поместить список использованных обозначений и сокращений.

16. Возвращение рукописи на доработку не означает, что статья уже принята к печати. Доработанный вариант необходимо прислать в редакцию вместе с ее начальной версией,

рецензией и ответом на замечания рецензента не позднее двух месяцев со дня его отсылки. В противном случае первоначальная дата поступления статьи при публикации не указывается.

17. Решение редакционной коллегии о принятии статьи к печати или ее отклонении сообщается авторам.

18. После выхода журнала авторам бесплатно высылаются пять оттисков их статьи.

Адрес редакции:

Физический факультет НГУ (к. 420 главного корпуса), редакция журнала «Вестник НГУ». Серия: Физика, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия.

Электронный адрес: physics@vestnik.nsu.ru и zarvin@phys.nsu.ru