

17 327 800

ISSN 0453-8048

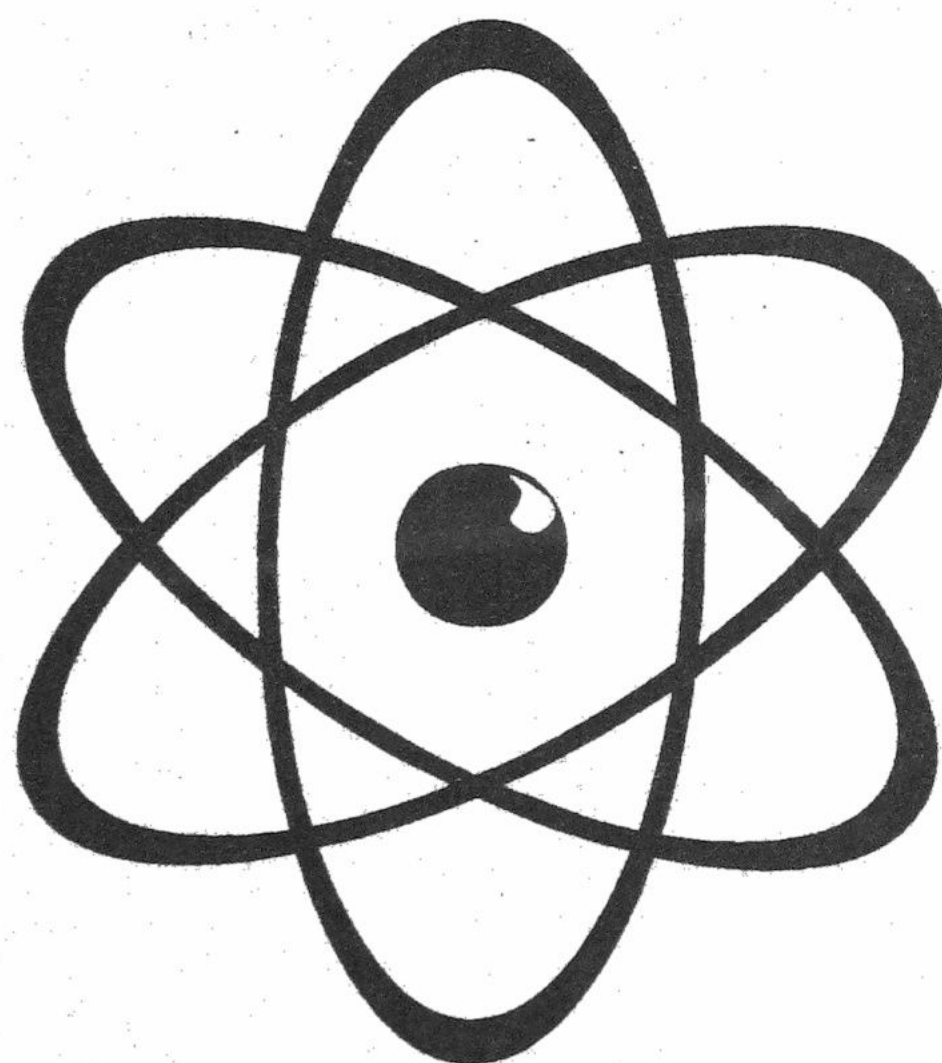
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ

ВІСНИК

**ХАРКІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ**

ім. В. Н. Каразіна

№ 496



2000

“Вісник Харківського національного університету” (серія фізична «Ядра, частинки, поля») є збірником наукових робіт, який містить результати досліджень з фізики елементарних частинок, ядерної фізики, фізики плазми та плазмових технологій, фізики твердого тіла та радіаційної фізики. Збірник призначений для викладачів, наукових співробітників, аспірантів та студентів, що спеціалізуються у відповідних або суміжних галузях науки. Його включено до Переліку наукових видань ВАК, в яких можуть публікуватися основні результати дисертаційних робіт. До публікації приймаються статті, написані українською, російською або англійською мовами згідно з правилами для авторів і мають позитивні рекомендації двох рецензентів, призначених редакцією. Запланована періодичність випуску збірника — 4 рази на рік.

Редакційна колегія

Головний редактор — **Залобовський І.І.** — чл.-кор. НАН України, д-р ф.-м. наук, професор
Заст. головного редактора — **Азаренков М.О.** — д-р ф.-м. наук, професор

Члени редакційної колегії:

Адаменко І. М. — д-р ф.-м. наук, професор
Бережной Ю. А. — д-р ф. -м. наук, професор
Дуплій С. А. — д-р ф.-м. наук
Коваль А. Г. — д-р ф.-м. наук, професор
Кондратенко А. М. — д-р ф.-м. наук, професор
Лазурик В. Т. — д-р ф. -м. наук
Лапшин В. І. — д-р ф. -м. наук, професор
Нечипоренко Є. П. — д-р ф.-м. наук, професор
Пелетмінський С.В. — акад. НАН України, д-р ф.-м. наук, професор
Сорокін Д.П. — д-р ф. -м. наук
Степанов К.М. — чл.-кор. НАН України, д-р ф.-м. наук, професор
Товстяк В. В. — д-р ф.-м. наук
Толок В. Т. — чл.-кор. НАН України, д-р ф.-м. наук, професор
Шульга М. Ф. — д-р ф.-м. наук, професор

Відповідальний секретар — **Кірдін А.І.** — к. ф.-м. наук

Адреса редакційної колегії: 61108, Харків, пр. Курчатова, 31.

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна. Фізико-технічний факультет, к. 402.
Тел. 35-25-66. E-mail: kirdin@pht.univer.kharkov.ua, kirdin@pem.kharkov.ua

Друкується за рішенням Вченої Ради Харківського національного університету ім. В.Н. Каразіна.
Протокол № 9 від 24 листопада 2000 р.

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ №4063 від 2.03.2000

ISSN 0453-8048

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ

ВІСНИК

ХАРКІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ

ім. В. Н. Каразіна

№ 496

серія фізична

«Ядра, частинки, поля»

Заснований у 1998 р.

Випуск 4 /12/

Харків

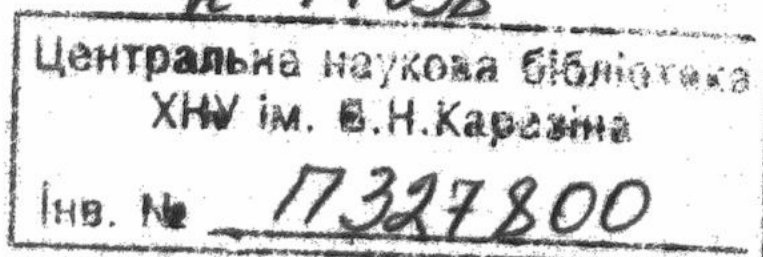
2000

ВІСНИК

00814211

Зміст

Ю.А. Касаткин, И.К. Кириченко, А.П. Корж	Масштабные свойства инклюзивных спектров электрорасщепления дейтрона в квазиупругой области	3
В.Д. Афанасьев, Л.М. Афанасьева	Математическая модель потенциала взаимодействия атомов	7
S.A. Duplij, W. Marcinek	Semisupermanifolds, regularization and categorization	11
И.Н. Кудрявцев	Особенности динамики кристаллической решетки сверхпроводящего ниобия	18
А.А. Бабаскин, Ю.В. Каменский, В.Г. Кириченко, А.В. Киричок, В.М. Куклин, А.Н.Твардовский	Формирование распределенных дефектов на поверхности кристаллов	23
Н.А. Азаренков, Ю.А. Акимов, А.В. Гапон	Самовоздействие потенциальных поверхностных волн на границе металла с магнитоактивной плазмой конечного давления	29
О.А. Шишкин	Резонансные острова в магнитных ловушках стеллараторного типа	34
V.F. Aleksin, V.D. Khodusov	Temporal and spatial correlations of fluctuations in gas dynamics of quasi-particles	39
В.А. Лисовский	Критерий Бома для столкновительного случая	43
Ю.А. Бизюков, В.И. Муратов, В.Д. Федорченко	Дифракционное излучение когерентных электронных сгустков	46
V.T. Lazurik, V.V. Chorniy, Yu.V. Rogov, A.V. Chorniy, V.P. Moskvina	Modeling of electron beam tracking and X-ray generation for the equipment optimization	49
В.П. Демуцкий	Влияние периодичности отображения на устойчивость динамического хаоса	55
А.А. Ашеко, В.Г. Гордиенко, А.К. Стрельцина, Е.А. Шарков	Диэлектрические свойства водных электролитных систем. II. Частота 35,5 ГГц	58
М.М. Пеліхатий, М.В. Белан, В.П. Колісник, В.В. Колісник, М.І. Коваленко, Ю.В.Дубровін, А.К. Гнап	Формування перехідного шару при взаємодії потоків металевої плазми з діелектриками	63
V.P. Demutsky, O.M. Pignasty, I.A. Ponomaryova, V.M. Rashkovan	Docking of space vehicles in "running magnetic potential well"	69
О.В. Козиненко	Инженерная методика расчета динамики температур, температурных напряжений и коэффициента эрозии при ионно-плазменной обработке	72
A.V. Chorniy	Simulation of electron motion in beam under self-magnetic field influence	75
SSQFT'2000 - міжнародна наукова конференція пам'яті Дмитрія Васильєвича Волкова		79
На передньому крає науки (к 75-лєтїю со дня рождження Д.В. Волкова)		81



УДК 539.172.3

МАСШТАБНЫЕ СВОЙСТВА ИНКЛЮЗИВНЫХ СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОРАСЩЕПЛЕНИЯ ДЕЙТРОНА В КВАЗИУПРУГОЙ ОБЛАСТИ

Ю.А. Касаткин, И.К. Кириченко, А.П. Корж

Национальный научный центр Харьковский Физико-Технический Институт,
61108, Украина, г. Харьков, пер. Академический 1,
Украинская инженерно-педагогическая академия,
61003, Украина, г. Харьков, ул. Университетская 16,
Харьковская государственная академия технологии и организации питания,
61127, Украина, г. Харьков, ул. Ключовская 333,
Поступила в редакцию 24 октября 2000г.

Рассмотрено существование скейлинга в инклюзивных процессах $ed \rightarrow e'pn$. Обсуждены необходимые и достаточные условия возникновения скейлинга и показано их выполнение в квазиупругой области. Проведено описание сечений рассеяния на дейтроне при малых и больших углах рассеянных электронов при энергиях 779 МэВ и 15,742 ГэВ.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: скейлинг, инклюзивные сечения, электрорасщепление дейтрона, масштабные свойства.

В последние годы в литературе [1-3] широко обсуждается проблема [1] Y – скейлинга, суть которого в том, что сечения инклюзивных процессов электрорасщепления ядер в квазиупругой области при различных значениях Q^2 , ν представимы некоторой универсальной функцией $F(Y)$:

$$F(Y) = (d^2\sigma/d\Omega'dE_2)(dE_2/dY) / [Z\sigma_{po} + (A-Z)\sigma_{no}], \quad (1)$$

где Y – минимально допустимый при заданных Q^2 , ν импульс спектатора в лабораторной системе (л.с.), который определяется уравнениями

$$\nu + M = \varepsilon(\vec{q} - \vec{Y}) + \varepsilon(\vec{Y}), \quad \cos(\vec{q}\vec{Y}) = -1, \quad (2)$$

$\sigma_{p(n)o}$ – сечение упругого eN – рассеяния на покоящемся on-shell нуклоне, A и Z – массовый номер ядра и число протонов в нем, $q = (\nu, \vec{q})$ импульс виртуального фотона ($q^2 = (k - k')^2$, $\nu = dq/M$ или в л.с. $\nu = E_1 - E_2$), k , k' – импульсы начального и конечного электронов ($|\vec{k}| = E_2$; $|\vec{k}| = E_1$; $k^2 = k'^2 = 0$). Из уравнений (2) легко получить

$$Y = -\frac{1}{2} \left(\tilde{q} - (M + \nu) \sqrt{\frac{s - M^2}{s}} \right), \quad s = (d + q)^2, \quad \tilde{q} = |\vec{q}|, \quad (3)$$

где d – импульс мишени (в л.с. $d = (M, \vec{0})$).

Исследование Y – скейлинга дает возможность извлечения информации об одночастичных волновых функциях связанной системы. Теоретический анализ скейлинговой функции $F(Y)$ в основном проводился традиционно ядерными методами [1-3]. С другой стороны, Y – скейлинг, так же как и бьеркеновский, очевидно, является следствием доминирующей роли одночастичных механизмов при больших относительных импульсах в конечной адронной системе. Естественно, энергии (импульсы), при которых условия применимости одночастичного приближения не выполняются, следует рассматривать лишь как предскейлинговые. Именно с этим связано «возникновение» целого ряда так называемых Y_0 , Y_1 [3] и других возможных скейлингов. Далее, поскольку условия «одночастичности» процесса наилучшим образом выполняются при высоких импульсах виртуальных фотонов (в [4], например, $0,8 \leq Q^2 \leq 6$ (ГэВ/с)² и экспериментально исследована область $|Y| \leq m$, где m – масса нуклона), исследование Y – скейлинга, универсальной функции $F(Y)$ и анализ условий его возникновения естественно проводить полностью релятивистски. Это, как известно [5, 6], требует последовательного учета движения нуклонов в элементарном акте eN – взаимодействия, виртуальностей промежуточных частиц и вклада антинуклонных конфигураций. Все эти моменты в предыдущих расчетах не исследовались. Решению этих задач, а также вопросов, связанных с проблемой извлечения эффективного импульсного распределения нуклонов [5] в дейтроне из инклюзивных электронных спектров в квазиупругой области, посвящена настоящая работа.

Проведем исследование явления Y – скейлинга на примере реакции [7]:



Открытым как в экспериментальном, так и в теоретическом плане остается вопрос о наличии скейлинга при больших углах θ рассеяния электронов. В связи с этим актуальны, во-первых, получение

экспериментальных данных для преимущественно магнитного eN -взаимодействия, во-вторых, теоретическое исследование условий возникновения скейлинга инклюзивных сечений реакции (4) в квазиупругой области и получение релятивистского обобщения для скейлинговой функции при произвольных углах θ .

Проиллюстрируем развитый подход к описанию электрорасщепления дейтрона в квазиупругой кинематике [7, 8] на примере инклюзивных спектров реакции (4) при начальных энергиях падающего и углах рассеянного электронов $E_1 = 779$ МэВ, $\theta = 127^\circ$ и $E_1 = 15,742$ ГэВ, $\theta = 10^\circ$, что соответствует значениям переданного импульса $Q^2 \leq 1,16$ и $Q^2 \leq 6$.

С точки зрения теории скейлинг сечений процесса (4) является следствием масштабных свойств структурных функций. Поэтому поиск скейлинга на уровне сечений основывается на анализе масштабных свойств обеих структурных функций, определяемых следующим образом:

$$d^2\sigma/d\Omega dE_2 = \sigma_M |\vec{q}|^{-1} \{W_2^{(e)}(q^2, \nu) + 2tg^2(\theta/2)W_1^{(e)}(q^2, \nu)\} \quad (5)$$

где σ_M - сечение Мотта, $\nu = qd/M$, d и q - импульсы дейтрона и виртуального фотона ($d^2 = M^2$, $Q^2 = -q^2 > 0$), E_2 - энергия рассеянного электрона. В полюсном приближении, используя [7], получаем

$$W_{\{1,2\}}^{(d)}(q^2, \nu) = 2\pi m^3 \int_z^{x_F} dx G(x) \left\{ \frac{[1 - \beta(x) + A]W_1^{(N)}(q^2) + BD}{(C^2 + Q^2/q^2 B)D + 2C\beta(x) \sum_{i=p,n} F_{ii}(F_{ii} + F_{2i})} \right\}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} W_1^{(N)} &= \tau \sum_{i=p,n} (F_{ii} + F_{2i})^2, \quad W_2^{(N)} = \sum_{i=p,n} (F_{ii}^2 + \tau F_{2i}^2), \quad \tau = Q^2/M^2, \\ A &= \beta(x)/x_F + [1 - 2x - \alpha(x) + \beta(x)]/2\tau, \quad x = (m^2 - t)/M^2, \quad x_F = Q^2/2M\nu, \\ B &= \{4x(1 - x_F) - (1 - 2x_F)^2 + 4x_F x[1 - x(1 - x_F)]/\tau - 4x^2 x_F^2/\tau^2\} / 2(1 + 4x_F^2/\tau), \\ C &= [2x_F(1 + x/\tau) + 4x_F^2(1 - x)/\tau] / (1 + 4x_F^2/\tau), \quad t = (d - n)^2, \\ D &= [1 - \beta(x)]W_2^{(N)} + [1 - \beta(x) - \alpha(x)] \sum_{i=p,n} (F_{ii}F_{2i}) + \tau A \sum_{i=p,n} F_{2i}^2, \end{aligned}$$

$F_{1,2}^{(N)}(q^2)$ и $W_{1,2}^{(N)}$ - упругие электромагнитные формфакторы и структурные функции нуклонов; $\alpha(x)$ и $\beta(x)$ определены [5, 7], $G(x)$ - эффективное импульсное распределение, выражающееся через волновые функции дейтрона. Результаты релятивистских расчетов (5), (6) с учетом S -, P -, D -волн в волновых функциях показаны на рис. 1, 2.

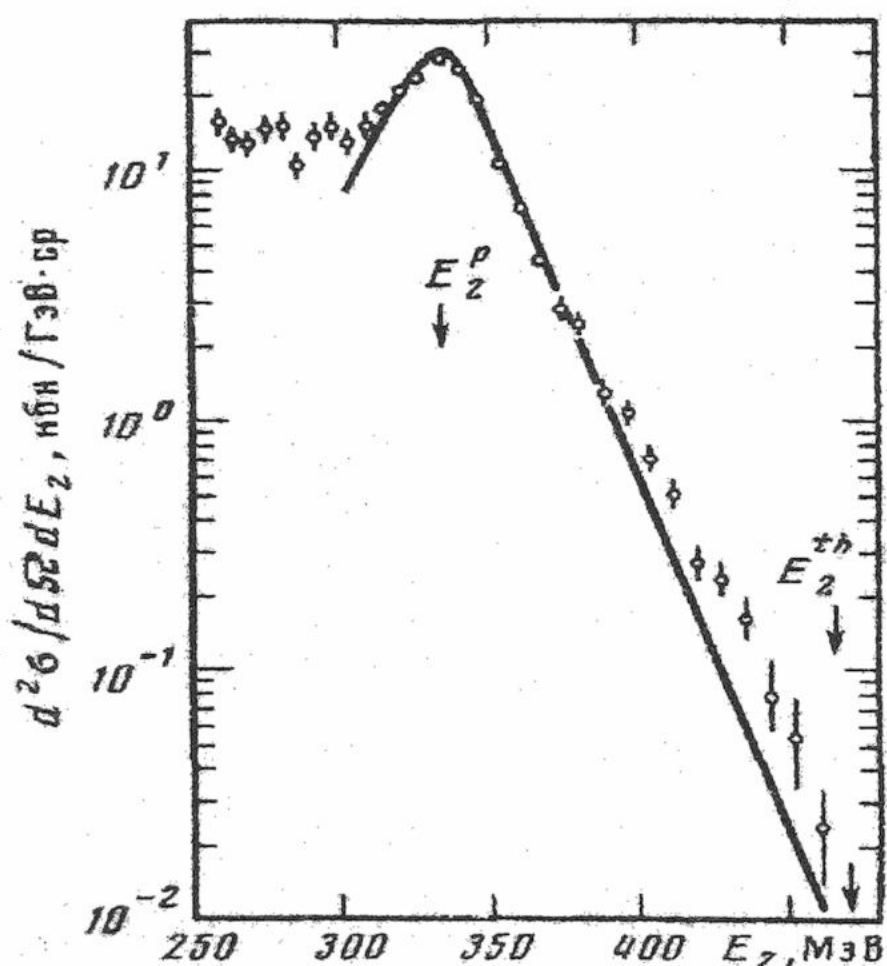


Рис. 1. Инклюзивный спектр электродезинтеграции дейтрона. Сплошная кривая - релятивистский расчет по формулам (5), (6). Стрелками показаны положения порога процесса (4) и пика упругого рассеяния на протоне $E_1 = 779$ МэВ, $\theta = 127^\circ$, $Q^2 = 1,164$ ГэВ².

Под масштабным преобразованием будем понимать такие преобразования q^2 и ν , которые оставляют без

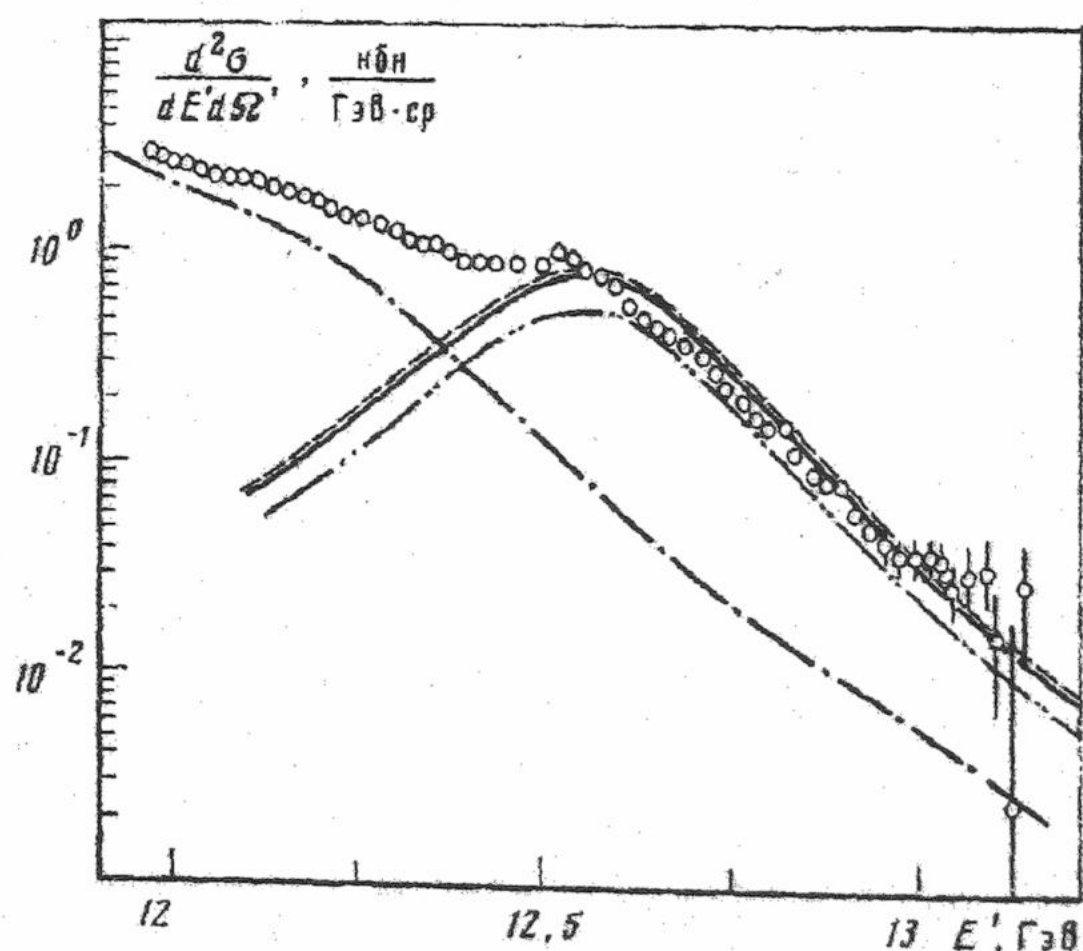


Рис. 2. Инклюзивный спектр электродезинтеграции дейтрона. Дважды штрих-пунктирная кривая - расчет с электромагнитными форм-факторами dipole fit и $G_E = 0$. Штрих-пунктирная линия - вклад неупругих каналов [7], при переданном импульсе $Q^2 = 6$ (ГэВ/с)².

изменения z в (6):

$$z = (\tau/2x_F) \left\{ 1 - \left[(\tau + 4x_F^2)/\tau + x_F/(1-x_F) \right]^{1/2} \right\}. \quad (7)$$

В (6) нарушение масштабной инвариантности структурных функций в основном [7] обусловлено внутринуклонной динамикой и эффектами виртуальности (каждая $W_{1,2}^{(d)}$ выражается через обе структурные функции $W_{1,2}^{(N)}$). Поэтому идея «восстановления» масштабных свойств путем исключения из $W_{1,2}^{(d)}$ внутринуклонной динамики, которая неявно использовалась в [4] при определении скейлинговой функции $F(Y)$, в случае произвольных q^2 , ν , x неприемлема. При условии $2x_F z/\tau \ll 1$ выражения (6) упрощаются:

$$L_{\left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} \right\}}(z, x_F) = W_{\left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} \right\}}^{(d)}(z, x_F) / W_{\left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} \right\}}^{(N)} \approx 2\pi m^3 \left\{ \frac{1}{4x_F^2} \right\}_z^\infty G(x) f(x, x_F) dx, \quad (8)$$

$$z \approx (1 - 2x_F)^2 / 4(1 - x_F),$$

где $f(x, x_F) = 1 + \beta(x)(1 - x_F)/x_F$. Однако, зависимость (8) от x_F разрушает скейлинг при удалении от максимума квазиупругого пика ($x_F = 1/2$), а масштабные свойства $W_{1,2}^{(d)}$ различны при $x_F \neq 1/2$. Масштабно-инвариантную функцию $L(z)$ следует определить в виде

$$L(z) = L_1(z, x_F) / f(z, x_F) = L_2(z, x_F) / (4x_F^2 f(z, x_F)), \quad (9)$$

где $f(x, x_F) = 1 + (z/x_F)(1 - x_F)/(1 + z)$. В (9) учтено, что в области $k \leq 0,5$ ГэВ/с ($k = m[z(2+z)]^{1/2}$) вклад P -волн (ν_T, ν_S) в дейтроне несуществен [7]

$$G(x) \Big|_{\nu_T, \nu_S=0} = \Psi_d^2(x) = u^2(x) + w^2(x), \quad \beta(x) = x/(1+x),$$

а $f(x, x_F)$ - плавная функция по сравнению с $G(x)$. Сравнивая (8), (9), видим, что $L(z)$ действительно масштабна-инвариантна:

$$L(z) = 2\pi m^3 \int_z^\infty \Psi_d^2(x) dx. \quad (10)$$

Зная структурные функции, с помощью (9), (10) в принципе можно извлечь $\Psi_d^2(x)$ (но лишь до $k \sim 0,5$ ГэВ/с). Объединяя (8)-(10), получаем релятивистское обобщение скейлинга на уровне сечений при произвольных θ

$$L(z) = |\vec{q}| \frac{E_2}{E_1} \frac{\delta(\theta, x_F)}{f(z, x_F)} \frac{d^2\sigma/d\Omega dE_2}{d\sigma^N/d\Omega}, \quad (11)$$

$$\delta(\theta, x_F) = \frac{1 + 2tg^2(\theta/2\kappa)}{4x_F^2 + 2tg^2(\theta/2\kappa)},$$

$$\kappa = \begin{cases} (\mu_p^2 + \mu_n^2)/\mu_n^2, & F_{1n} \equiv 0 \\ \tau, & G_{en} \equiv 0. \end{cases}$$

Для $\theta \rightarrow 0, \pi$, упрощенное выражение для скейлинговой функции $I(z)$ [8] имеет вид

$$I(z) = |\vec{q}| \frac{E_2}{E_1} \frac{d^2\sigma/d\Omega dE_2}{d\sigma^{(N)}/d\Omega} \Big|_{\theta \rightarrow \pi} = \quad (12)$$

$$= |\vec{q}| \frac{E_2}{E_1} \frac{d^2\sigma/d\Omega dE_2}{4x_F^2 d\sigma^{(N)}/d\Omega} \Big|_{\theta \rightarrow 0}.$$

Таким образом, функции $I(z)$, полученные из обработки экспериментальных сечений под малыми и большими углами, должны совпадать.

На рис. 3 представлены результаты измерений функции $I(z)$ для $\theta = 127^\circ$ и $\theta = 8^\circ, \dots, 10^\circ$, обработанные согласно (12). Штрихами вблизи максимума $I(z)$ показан коридор для экспериментальных данных. Наблюдается хорошее согласие результатов и подтверждается наличие скейлинга при

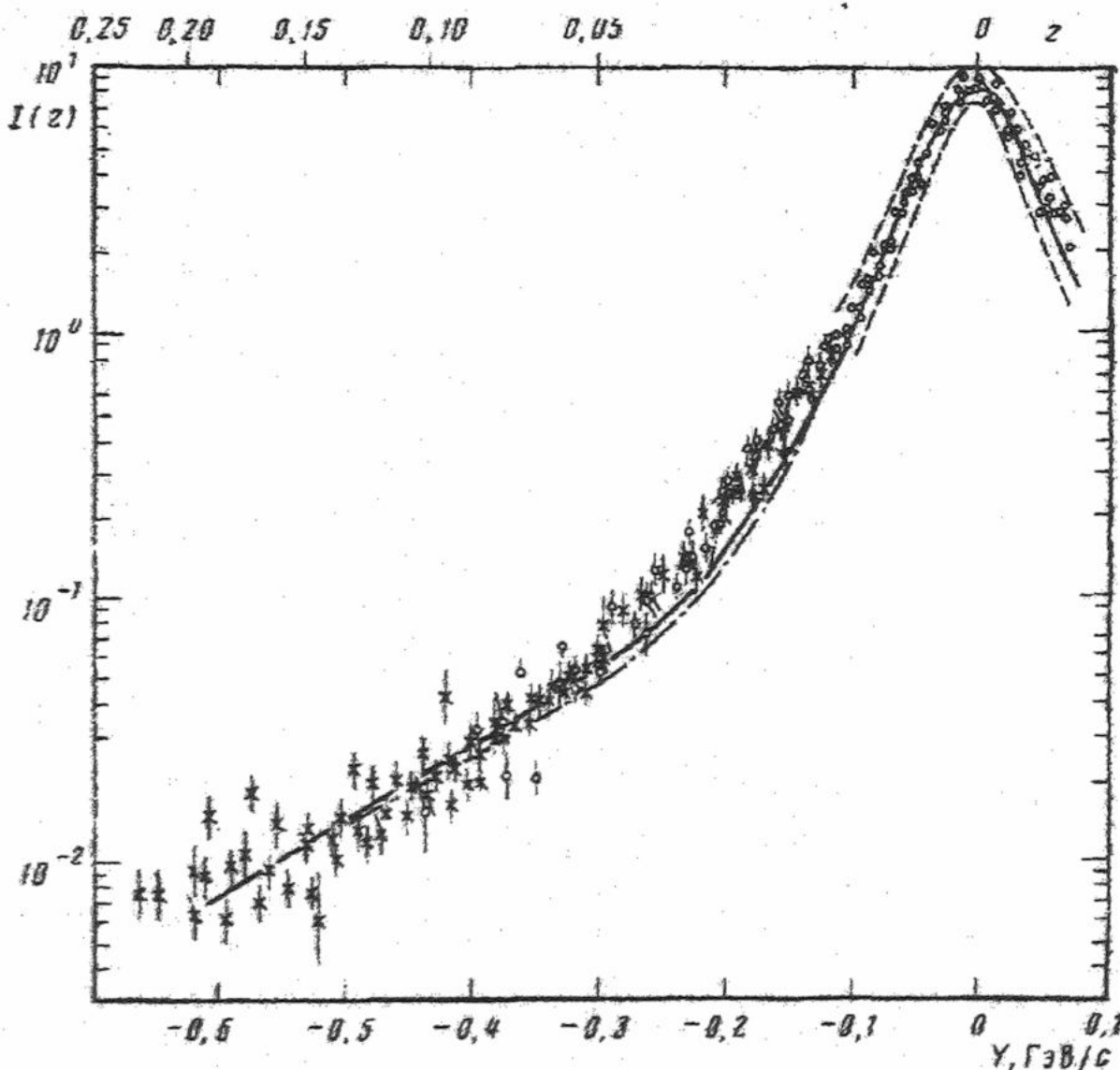


Рис. 3. Скейлинговая функция $I(z)$. Точки: $\circ$ - из работы [8], $\times$ - данные SLAC [4] (вблизи максимума показаны в виде коридора, ограниченного штриховыми линиями). Сплошная кривая - асимптотический расчет [8], штрих-пунктирная - в динамике на световом фронте [8]. Скейлинговая переменная Y и степень виртуальности нуклона z связаны соотношением $Y = -m[z(2+z)]^{1/2}$.

различных θ . Сплошная кривая - результат расчетов по асимптотическим формулам [7]:

$$I(z) = L_1(z, x_F) \Big|_{x_F \rightarrow \bar{x}_F} = (1/4x_F^2) L_2(z, x_F) \Big|_{x_F \rightarrow \bar{x}_F}, \quad \bar{x}_F \equiv (1 + \sqrt{2z})/2. \quad (13)$$

Штрих-пунктир - то же самое, но в динамике на световом фронте [8] ($Q^2 = 6 \text{ ГэВ}^2$, $\theta = 8^\circ$).

Таким образом, в настоящей работе показано релятивистское обобщение для скейлинговых функций как на уровне структурных функций (8)-(10), так и на уровне сечений (11), (12). Приведенные формулы пригодны для извлечения волновой функции дейтрона из инклюзивной реакции (4). Результаты измерений сечений (4) под большими углами подтверждают версию скейлинга в условиях, когда доминирует магнитное eN - взаимодействие. Инклюзивные сечения, измеренные под большими и малыми углами и нормированные согласно (12), практически не зависят от кинематических условий и объединяются в универсальную функцию $I(z)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. West G.B. // Phys. Rev. 1975. C18. P.263-271.
2. Kawazoe Y. et. al. // Prog. Theor. Phys. 1975. V.54. P.1394-1399.
3. Ciofi de Atti C. et al. // Nucl. Phys. 1981. V.A358. P.183-187.
4. Bosted P. et. al. // Phys. Rev. Lett. 1982. V.49. № 19. P.1380-1383.
5. Нагорный С.И. и др. // ЯФ. 1984. Т. 40. Вып. 4(10). С.907-914.
6. Нагорный С.И. и др. // ЯФ. 1984. Т. 40. Вып. 5(11). С.1184-1193.
7. Нагорный С.И. и др. // ЯФ. 1985. Т. 42. Вып. 4(10). С.870-884.
8. Есаулов А.С. и др. // ЯФ. 1986. Т. 44. Вып. 5(11). С.1187-1190.

SCALING INCLUSIVE SPEKTRA OF DEUTERON ELECTRODISINTEGRATION IN QUASIELASTIC RANGE

Yu.A. Kasatkin, I.K. Kirichenko, A.P. Korzh

*National Science Center of Kharkov Physical & Technical Institute,
61108, Ukraine, Kharkov, Academic 1,
Ukraine Engineer-Pedagogical Academy,
61003, Ukraine, Kharkov, street. University 16,
Kharkov State Academy of Technology and Food Management,
61127, Ukraine, Kharkov, street. Klochkovskaya 133,*

The existence scaling in inclusive processes $ed \rightarrow e'pn$ is reviewed. The indispensable and sufficient conditions of originating scaling are debated and their running in of quasielastic area is rotined. The description of cross-sections of dissipation on a deuteron is conducted at small and large angles of stray electrons at energies 779 MeV and 15,742 GeV.

KEY WORDS: scaling, inclusive cross-section, electroscission of a deuteron, scale properties.

УДК 539.18/19

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ

В.Д. Афанасьев,* Л.М. Афанасьева**

*Харьковский Национальный университет, кафедра экспериментальной ядерной физики, Харьков, 61108, пр. Курчатова, 31

**Харьковский Государственный экономический университет, кафедра высшей математики, Харьков, 61109, пр. Ленина, 9

Поступила в редакцию 24 Ноября 2000 г.

Вычислен потенциал взаимодействия пары Ag–Ag для оболочечной модели распределения плотности электронов в приближении недеформируемой электронной оболочки. Учитывалось обменное взаимодействие между электронами заполненных оболочек. Приводится формула, описывающая результаты численных расчетов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: потенциал, обменное взаимодействие, электронная оболочка.

1. Рассеяние ионов на атомах при энергиях их относительного движения $E > 0.1 \text{ МэВ}/M_{\text{ат}}$ можно описать, рассматривая их взаимодействие как электростатическое и пренебрегая эффектами, связанными с полем движущегося заряда и с возбуждением или ионизацией атомов. Потенциал взаимодействия $U(R)$ определяется как увеличение полной энергии системы из двух атомов в основном состоянии при их медленном (адиабатическом) сближении из бесконечности до относительного расстояния R .

Если R будет порядка радиуса первой боровской орбиты $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, то основной вклад в величину $U(R)$ будет давать взаимодействие внутренних электронов, к которым применимо приближение Томаса–Ферми. В силу связи между распределением плотности электронов ρ и их кинетической энергией, полная энергия электронов системы двух взаимодействующих атомов дается формулой [1]:

$$t^{-2}H = \frac{3}{5}\lambda \int \rho^{5/3} dv - \sum_i \frac{Z_i}{r_i} \rho dv + \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dv dv', \quad (1)$$

где $\lambda = (3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 / 2m_e^2 \approx 2.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, Z_i , r_i — заряд и расстояние до i -того ядра. Первое слагаемое в (1) есть кинетическая энергия электронов по Томасу–Ферми, второе — энергия взаимодействия электронов с ядрами и третье — электронов между собой. Применяя к (1) вариационный принцип, Фирсов [2] получил уравнение Томаса–Ферми–Фирсова взаимодействия двух атомов с зарядами Z_1 , Z_2 :

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \phi(R/a_{TF}), \quad (2)$$

где a_{TF} — характерная длина экранирования, введенная Фирсовым,

$$a_{TF} = (9\pi^2/128)^{1/3} a_0 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}.$$

Для $R < a_0$, где на кулоновское взаимодействие атомных ядер заметное влияние оказывает экранирование атомными электронами, Бор предложил кулоновский потенциал с экспоненциальным экранированием (потенциал Бора):

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} e^{-R/a_B}, \quad (3)$$

с параметром $a_B = a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$. Введенное Бором чисто экспоненциальное экранирование приводит к более быстрому убыванию потенциала (3) по сравнению с функцией экранирования Томаса–Ферми. На расстояниях $R > (2-3) a_0$ потенциал (2) также не описывает атомные взаимодействия, во-первых, из-за того, что атом в модели Томаса–Ферми бесконечен, а во-вторых, из-за того, что в (1) не было учтено обменное взаимодействие.

В приближении Томаса–Ферми–Дирака (TFD) учет обменного взаимодействия приводит к появлению в уравнении (1) дополнительного слагаемого, равного $0.74e^2 \int \rho^{4/3} dv$, и ответственного за взаимодействие электронов с одинаковыми квантовыми числами [1]. Расчет потенциала в этом приближении был выполнен Абрахамсоном, Хатчером и Виньярдом [3]. Полагалось, что распределение плотности электронов в атоме ограничи-

валось некоторым радиусом обрезания r_b , и при вычислении взаимодействия электронов интегрирование проводилось по области перекрытия электронных облаков $D_{1,2}$. Соответствующее выражение для $U(R)$ имеет вид:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2R} \left[\Phi(Z_1^{1/3} R/a) + \Phi(Z_2^{1/3} R/a) + \Lambda - 3.89 a_0 (Z_1 + Z_2) \right], \quad (4)$$

где

$\Phi(x)$ – функция экранирования Томаса–Ферми–Дирака, $a = 0.8853 a_0 = 0.468 \cdot 10^{-8}$ см,

$$\Lambda = \frac{e^2}{6} \int_{D_{1,2}} \left[2.87 a_0 [(\rho_{01} + \rho_{02})^{5/3} - (\rho_{01}^{5/3} + \rho_{02}^{5/3})] - 1.477 [(\rho_{01} + \rho_{02})^{4/3} - (\rho_{01}^{4/3} + \rho_{02}^{4/3})] \right] dv,$$

$\rho_{0i}(r_i)$ – невозмущенная плотность электронов.

По сравнению с потенциалом Томаса–Ферми потенциал (4) не является универсальным и должен вычисляться для каждой пары атомов. Абрахамсон [4] впервые рассчитал межатомные потенциалы для пар атомов с $Z = 2 \div 105$ и в интервале R от $0.01 a_0$ до $6 a_0$. Во всех случаях наблюдалось основное свойство: если представить $U(R)$ в полулогарифмическом масштабе, то всегда существует значительный интервал R , где $U(R)$ почти точно описывается линейной функцией и где потенциал можно представить в виде потенциала Борна–Майера, известного как потенциал отталкивания заполненных электронных оболочек:

$$U(R) = A e^{-bR}. \quad (5)$$

Применяя метод наименьших квадратов, были вычислены значения параметров потенциала A и b для каждой пары взаимодействующих атомов. В случае столкновения двух разных атомов их потенциал взаимодействия определялся “комбинационным правилом”:

$$U_{12} \approx (U_{11} U_{22})^{1/2}.$$

2. Адиабатические потенциалы (2), (4) описывают взаимодействие атомов при установившемся равновесном распределении электронов, которое соответствует минимуму их полной энергии [5,6]. Если предположить, что в течение времени соударения ($\tau \approx v_{ion}/a_0 \approx 10^{-17} - 10^{-16}$ сек) электронная плотность внутренних слоев не будет заметно изменяться, то столкновение можно рассматривать как мгновенное статическое кулоновское взаимодействие атомов с недеформируемыми электронными оболочками.

Распределение плотности электронов в атоме представим как суперпозицию квадратов одноэлектронных волновых функций Ψ_i :

$$\rho(\vec{r}) = -e \sum_i \Psi_i^2(\vec{r}). \quad (7)$$

Суммирование выполняется по всем занятым состояниям электронов. Плотность $\rho(\vec{r})$ удовлетворяет условию нормировки

$$4\pi \int \rho(r) r^2 dr = Z.$$

Запишем потенциальную энергию взаимодействия двух одинаковых, в целом нейтральных атомов, с зарядом ядра, равным Z , как функцию зависящего от времени расстояния R между их ядрами:

$$U_{1,2}(R) = \frac{Z^2 e^2}{R} + 2Ze \int \frac{\rho(r) dV}{|\vec{R} - \vec{r}|} + \iint \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV dV' + \frac{1}{2} \cdot \iint \frac{\rho_{12}(\vec{R}, \vec{r}) \rho_{21}(\vec{R}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV dV'. \quad (8)$$

Здесь первые три слагаемые описывают соответственно электростатическое взаимодействие ядер, ядер и электронов и электронов разных атомов друг с другом. Последнее слагаемое введено для учета обменного взаимодействия электронов, принадлежащих разным атомам, но имеющих одинаковые квантовые характеристики. Оно было взято в виде, аналогичном соответствующему слагаемому, входящему в уравнение Хартри–Фока для многоэлектронного атома [7]. $\rho_{12}(\vec{R}, \vec{r})$ и $\rho_{21}(\vec{R}, \vec{r}')$ – смешанные плотности, определенные следующим образом:

$$\rho_{12}(\vec{R}, \vec{r}) = -e \sum_{i=1} \Psi_i(\vec{r}) \Psi_i(|\vec{R} - \vec{r}|), \quad (9)$$

$$\rho_{21}(\vec{R}, \vec{r}') = -e \sum_{i=1} \Psi_i(\vec{r}') \Psi_i(|\vec{R} + \vec{r}'|). \quad (10)$$

$\vec{r}$ и $\vec{r}'$ – радиус-векторы i -го электрона в атомах «1» и «2», соответственно. Определения (9), (10) смешанной плотности будут справедливы для того случая, когда на каждой орбите будут находиться по два электрона с противоположно направленными спинами. Множитель $1/2$ перед обменным членом объясняется тем, что вклад в обменное взаимодействие будут давать только электроны с одинаковыми проекциями спинов, следовательно, и взаимодействовать будет только половина из них.

3. Рассчитаем потенциал (8) в случае пары Ar–Ar. Учитывая ортогональность волновых функций и теорему сложения для сферических гармоник, выразим электронные плотности (7), (9) и (10) через радиальные части волновых функций:

$$\rho(r) = -e \sum_{n,l} \frac{2(2l+1)}{4\pi} R_{n,l}^2(r), \quad (11)$$

$$\rho_{12}(x, x') = -e \sum_{n,l} \frac{2(2l+1)}{4\pi} R_{n,l}(x) R_{n,l}(x'). \quad (12)$$

и воспользуемся радиальными волновыми функциями [8]:

$$R_n = \left[\frac{(2\lambda_n / a_0)^{2\kappa_n + 1}}{(2\kappa_n)!} \right]^{1/2} r^{\kappa_n - 1} \exp(-\lambda_n \cdot r / a_0). \quad (13)$$

κ_n и λ_n – параметры, полученные методом минимизации полной энергии атома. Их величины для аргона даны в таблице 1. Суммирование в (11), (12) проводится по заполненным $1s$, $2s2p$ и $3s3p$ состояниям.

Таблица 1. Величины $2\kappa_n$ и $2\lambda_n$ для аргона.

n	$2\kappa_n$	$2\lambda_n$
1	2	37.09
2	4	12.86
3	6	4.417

Распределение плотности электронов в единицах a_0^3 , вычисленное по формуле (11), показано на рис. 1. Для сравнения представлена плотность $\rho(r)$, полученная по формуле Томаса–Ферми. Стрелкой указана величина радиуса обрезания электронной плотности в модели Томаса–Ферми–Дирака. Видно, что в отличие от плотности, рассчитанной по оболочечной модели, $\rho(r)$ в модели Томаса–Ферми, монотонно убывает с расстоянием и на больших расстояниях от ядра дает

завышенное значение плотности электронов.

Перейдем теперь к вычислению потенциала (8). Представим энергию кулоновского взаимодействия ядра атома «1» и его электронной оболочки с электронами другого атома (U_{1e}), как потенциальную энергию системы зарядов, находящихся в электрическом поле, создаваемом электронной оболочкой другого атома. Связь между распределением плотности и скалярным потенциалом $\phi_e(x)$ определяется уравнением Пуассона. В силу предположения о том, что электронная оболочка в течение времени соударения не деформируется и остается сферически-симметричной запишем:

$$\phi_e(R) = 4\pi \left\{ \frac{1}{R} \int_0^R \rho(r) r^2 dr + \int_R^\infty \rho(r) r dr \right\}. \quad (14)$$

Тогда, принимая во внимание, что система двух атомов симметрична относительно прямой, проходящей через их ядра, энергию кулоновского взаимодействия (U_{1e}) представим в виде:

$$\begin{aligned} U_{1e}(R) &= 2Ze\phi_e(R) + \int_V \rho(\vec{r}) \phi_e(|\vec{R} - \vec{r}|) dV = \\ &= 2Ze\phi_e(R) + 2\pi \int_0^1 \int_0^\infty \rho(r) r^2 \phi_e(|\vec{R} - \vec{r}|) dr \cdot d(\cos\theta), \end{aligned} \quad (15)$$

где $|\vec{R} - \vec{r}| = \sqrt{R^2 - r^2 - 2Rr \cos\theta}$ – расстояние от ядра атома «2» до электронов атома «1».

Расчеты выполнялись по следующему алгоритму. Вначале вычислялось $\phi_e(R)$, затем результаты вычислений аппроксимировались кубическим сплайном и полученная таким способом интерполяционная функция использовалась в дальнейших расчетах потенциала (7).

Обменный член в (8) перепишем в виде:

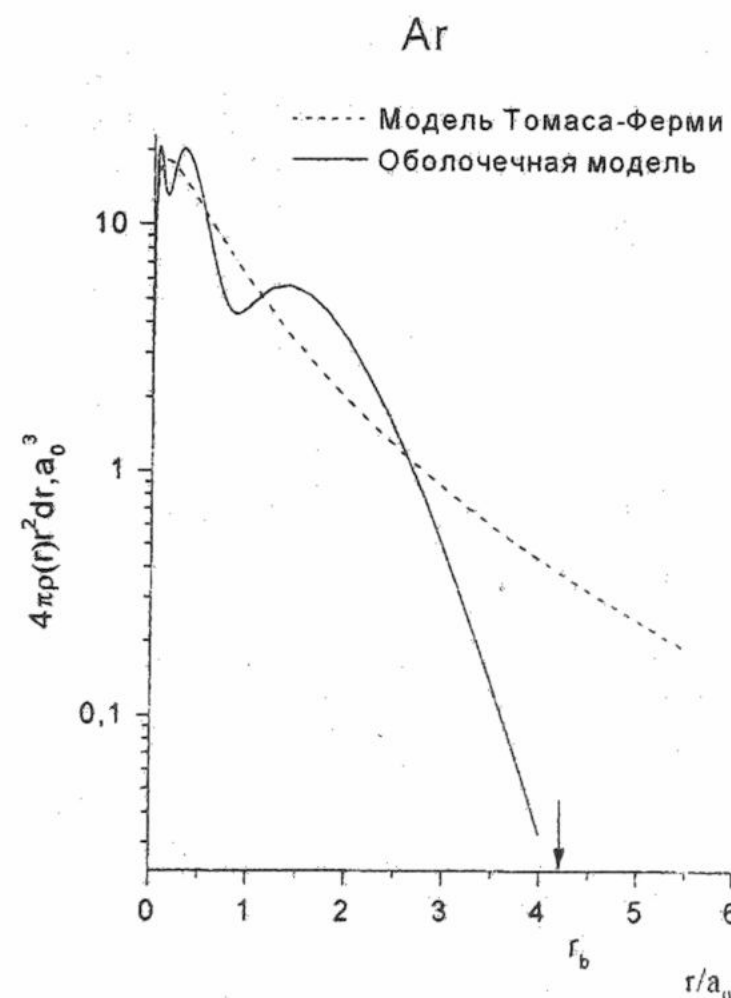


Рис.1. Радиальная плотность электронов.

$$U_{exch}(R) = \int \Psi(\vec{r}) \Psi(|\vec{R} - \vec{r}|) dV \int \frac{\Psi(\vec{R} + \vec{r}') \Psi(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' = 2\pi \int \int \Psi(\vec{r}) \Psi(|\vec{R} - \vec{r}|) F(\theta, r) r^2 dr d(\cos\theta). \quad (16)$$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r^2 + r'^2 + R^2 - 2rr' \cos \gamma - 2R(r \cos \theta - r' \cos \theta'),$$

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \phi'.$$

$F(\theta, r)$ – двумерный сплайн, полученный аппроксимацией результатов численного интегрирования внутреннего интеграла по объему ядра «1»

$$\iiint_{V'} \frac{\Psi(\vec{R} + \vec{r}') \Psi(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} r^2 dr d(\cos\theta) d\phi.$$

Результат вычислений показан на рис. 2 сплошной линией. На расстояниях, меньших $0.5a_0$, где основную роль играет кулоновское взаимодействие ядер, все потенциалы ведут себя почти одинаково. При $r > a_0$ потенциал (8) согласуется с результатами расчетов Гайдаенко и Никулина [9], полученных в рамках ТФД-модели с распределением электронов, рассчитанным по методу Хартри-Фока для свободных атомов.

Представим (8) в виде экранированного потенциала

$$U_m(R) = \frac{Z^2 e^2}{R} \cdot \Phi_h(R/a_0). \quad (17)$$

Применяя критерий χ^2 , было установлено, что функция экранирования $\Phi_h(R/a_0)$ удовлетворительно описывается суммой экспонент:

$$\Phi_h(x) = A_1 \exp(-x/t_1) + A_2 \exp(-x/t_2) \quad (18)$$

при $A_1 = 0.51 \pm 0.03$, $A_2 = 0.567 \pm 0.017$, $t_1 = 0.937 \pm 0.01$, $t_2 = 0.517 \pm 0.01$.

Формула (17) является удобной математической моделью потенциала взаимодействия атомов с распределением плотности электронов, полученного с помощью оболочечных волновых функций и учитывающего обменное взаимодействие и может применяться для нахождения таких характеристик столкновения, как сечение рассеяния, энергетические спектры атомов отдачи и др.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. П. Гамбош. Статистическая теория атома и ее применение, ИИЛ, М., 1951, 398 стр.
2. О. Б. Фирсов. Вычисление потенциала взаимодействия атомов. ЖЭТФ, 32, 696, 1957.
3. A.A. Abrahamson, R.D. Hatcher, G.H. Vineyard. Interatomic Repulsive Potentials at Very Small and Intermediate Separations. Phys.Rev. 121, 159, 1961.
4. A.A. Abrahamson. Born-Mayer-Type Interatomic potential for Neutral Ground-State Atoms with $Z=2$ to $Z=105$. Phys.Rev.178, A76, 1969.
5. К. Лейман. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов, М.:Атомиздат, 1979, 295 стр.
6. Fritsch Wolfgang, C.D. Lin. The semiclassical close-coupled description of atomic collisions: recent development and results. Phys.Repts. 202, 1991.
7. В.А. Фок. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
8. Gombas P., Szondy T. Solutions of Simplified Self consistent Field for All Atoms of Periodic System of Elements from $Z=2$ to $Z=92$. London, Adam Hilder Ltd., 1970.
9. V.L. Gaydaenko, V.K. Nikulin. Born-Mayer interatomic potential for atoms with $Z=2$ to $Z=36$. Chem.Phys.Lett., 1970, 7, 360.

MATHEMATICAL MODEL OF THE INTERATOMIC POTENTIAL

V.D.Afanas'ev*, L.M.Afanas'eva**

*Kharkov National University, Chair of Experimental Nuclear Physics, Khurchatov av., 31, Kharkov, 61108

**Kharkov State Economical University, Chair of Higher Mathematics, Lenin av., 9a, Kharkov, 61109

The interaction potential with shell model electron density of the Ar-Ar couple was calculated in undistorted electron shell approximation. Exchange interaction between identical electrons was taken into account. Formula that good describe the results of numeric calculations was also given.

KEY WORDS: potential, exchange interaction, electron shell.

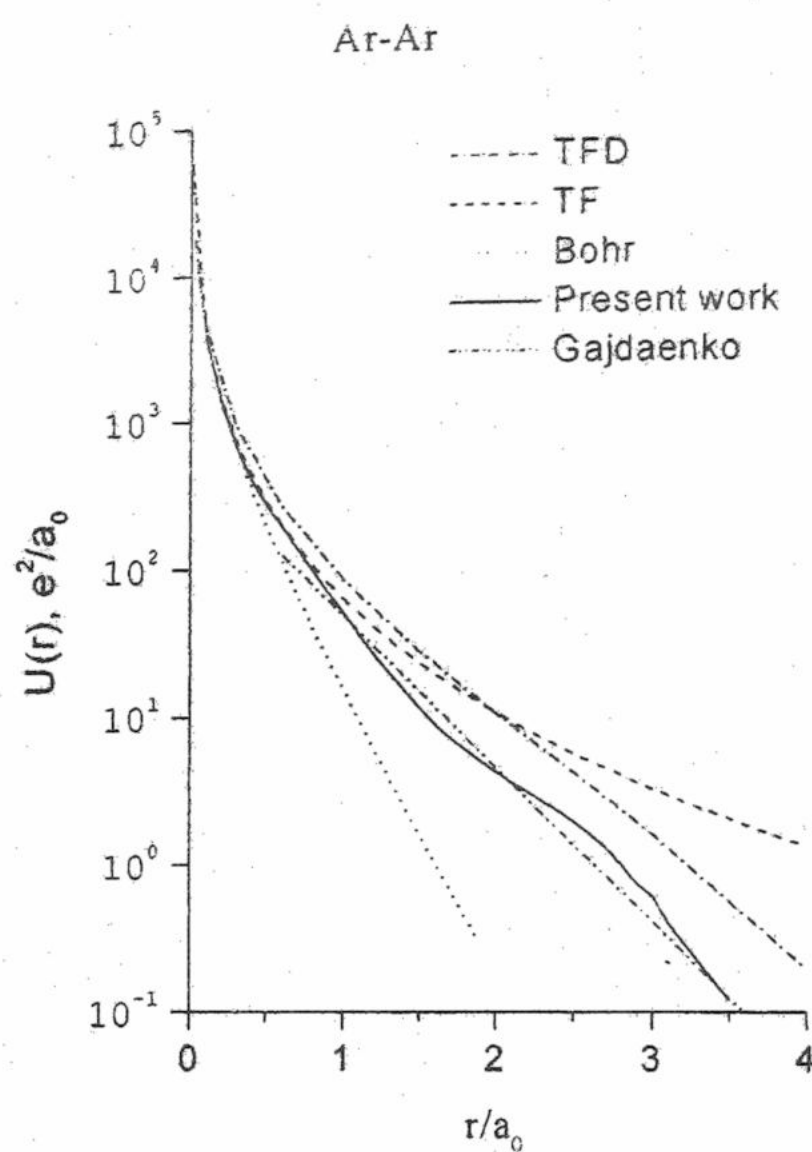


Рис.2. Потенцилы отталкивания между атомами Ar.

UDK 539.12

SEMISUPERMANIFOLDS, REGULARIZATION AND CATEGORIZATION

S. A. Duplij¹⁾, W. Marcinek²⁾¹⁾ Department of Physics and Technology, Kharkov National University, Kharkov 61077, UkraineE-mail: Steven.A.Duplij@univer.kharkov.ua. Internet: <http://gluon.physik.uni-kl.de/~duplij>²⁾ Institute of Theoretical Physics, University of Wrocław, Pl. Maxa Borna 9, 50-204 Wrocław, Poland

Received November 10, 2000

An approach of noninvertible extension from supermanifolds to semisupermanifolds is presented. Regularized cocycle conditions and “semicommutative” diagrams for noninvertible morphisms are introduced. “Obstructors” which measure the difference from commutative (invertible) case are defined. This regularization approach is applied to categories, where analogs of obstructors are n -cycles of morphisms. The regularized extensions of functors braidings and related structures in monoidal categories and a “noninvertible” analog of the Yang-Baxter equation is written. Similar generalization of (co-) algebras, left and right (co-) modules, tensor product of module actions is given.

KEYWORDS : supermanifold, semisupermanifold, morphism, monoidal category, functor, regularity, obstruction, Yang-Baxter equation, coalgebra, comodule

In this paper we extend the supermanifold noninvertible generalization approach introduced in [1] to such structures as categories, functors, (co-) algebras, (co-) modules etc. This approach is connected with higher regularities and reconsidering the role of identities [2]. More or less analogous methods of abstract structure generalization were considered for n -categories [3, 4, 5], topological QFT [6, 7], near-group categories [8, 9] (with noninvertible elements) and weak Hopf algebras [10, 11] in which the counit does not satisfy $\varepsilon(ab) = \varepsilon(a)\varepsilon(b)$ or satisfy some regularity conditions [12, 13]. Here we first show how noninvertibility can be introduced into the supermanifold theory [14, 15] and then apply this approach to more general structures.

PATCH DEFINITION OF SUPERMANIFOLDS

As is usually implied [16], the patch definition of a supermanifold $\mathfrak{M}_0$ differs from ordinary manifold (see e.g. [17]) by “super-” terminology only. One considers a collection of superdomains U_α such that $\mathfrak{M}_0 = \bigcup_\alpha U_\alpha$. Then in every superdomain U_α one takes some superfunctions (coordinate maps) $\varphi_\alpha : U_\alpha \rightarrow D^{n|m} \subset \mathbb{R}^{n|m}$, where $\mathbb{R}^{n|m}$ is a superspace in which our super “ball” lives, and $D^{n|m}$ is an open domain in $\mathbb{R}^{n|m}$. Next the pair $\{U_\alpha, \varphi_\alpha\}$ is called a *local chart* and it is claimed that the union of charts $\bigcup_\alpha \{U_\alpha, \varphi_\alpha\}$ is an atlas of a supermanifold [16]. Next gluing transition functions are introduced in the following (similar to non-super) way. Let $U_{\alpha\beta} = U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ and

$$\varphi_\alpha : U_\alpha \rightarrow V_\alpha \subset \mathbb{R}^{n|m}, \quad \varphi_\beta : U_\beta \rightarrow V_\beta \subset \mathbb{R}^{n|m}. \quad (1)$$

Then the above morphisms are restricted to $\varphi_\alpha : U_{\alpha\beta} \rightarrow V_{\alpha\beta} = V_\alpha \cap \varphi_\alpha(U_{\alpha\beta})$ and $\varphi_\beta : U_{\alpha\beta} \rightarrow V_{\beta\alpha} = V_\beta \cap \varphi_\beta(U_{\alpha\beta})$. The maps $\Phi_{\alpha\beta} : V_{\beta\alpha} \rightarrow V_{\alpha\beta}$ which are called to make the following diagram

$$\begin{array}{ccc} U_{\alpha\beta} & \xrightarrow{\varphi_\beta} & V_{\beta\alpha} \\ & \searrow \varphi_\alpha & \downarrow \Phi_{\alpha\beta} \\ & & V_{\alpha\beta} \end{array} \quad (2)$$

to be commuted are named transition functions of a supermanifold in a given atlas. First note, that $U_{\alpha\beta} \subset \mathfrak{M}_0$ and $V_{\alpha\beta}, V_{\beta\alpha} \subset \mathbb{R}^{n|m}$, and then from (2) one usually concludes that

$$\Phi_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \circ \varphi_\beta^{-1} \quad (3)$$

Additionally, from (3) it follows that transition functions satisfy the cocycle conditions $\Phi_{\alpha\beta}^{-1} = \Phi_{\beta\alpha}$ on $U_\alpha \cap U_\beta$ and

$$\Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha} = 1_{\alpha\alpha} \quad (4)$$

on triple overlaps $U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma$, where $1_{\alpha\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \text{id}(U_\alpha)$. Usually it is implied that all the maps φ_α are homeomorphisms [16], and they can be described by one-to-one invertible continuous (super)smooth functions. It was reasonable not to distinguish between U_α and $D^{n|m}$, i.e. locally supermanifolds are as the whole superspace $\mathbb{R}^{n|m}$ [16]. Then problem lies in another abstract level of the constructions, if the invertibility conditions are weakened (see, e.g. [1, 18]).

NONINVERTIBILITY AND SEMI-SUPERMANIFOLDS

Let us formulate a patch definition of an object analogous to supermanifold [1], i.e. we try to weaken demand of invertibility of coordinate maps (1). Consider a generalized superspace $\mathfrak{M}$ covered by open sets U_α as $\mathfrak{M} = \bigcup_\alpha U_\alpha$. We assume here that the maps $\varphi_\alpha : U_\alpha \rightarrow V_\alpha \subset \mathbb{R}^{n|m}$ are not all homeomorphisms, i.e. among them there are noninvertible maps (in case the superspace $\mathfrak{M}$ is noninvertibly generalized then instead of $\mathbb{R}^{n|m}$ one can consider some its noninvertible generalization).

Definition 1. A chart is a pair $\{U_\alpha^{inv}, \varphi_\alpha^{inv}\}$, where φ_α^{inv} is invertible morphism.

Definition 2. A semi-chart is a pair $\{U_\alpha^{noninv}, \varphi_\alpha^{noninv}\}$, where φ_α^{noninv} is noninvertible morphism.

Definition 3. A semi-atlas $\{U_\alpha, \varphi_\alpha\}$ is union of charts and semi-charts

$$\{U_\alpha^{inv}, \varphi_\alpha^{inv}\} \cup \{U_\alpha^{noninv}, \varphi_\alpha^{noninv}\}.$$

Definition 4. A semi-supermanifold is noninvertibly generalized superspace represented as semi-atlas $\mathfrak{M} = \bigcup_\alpha \{U_\alpha, \varphi_\alpha\}$.

To define an analog of transition function we should consider the same diagram (2), but we cannot use (3) through noninvertibility of some of φ_α 's. Therefore, first step is not to resolve (3) directly while finding transition functions.

Definition 5. Gluing semi-transition functions of a semi-supermanifold are defined by the equations

$$\Phi_{\alpha\beta} \circ \varphi_\beta = \varphi_\alpha, \quad \Phi_{\beta\alpha} \circ \varphi_\alpha = \varphi_\beta. \quad (5)$$

So we should find artificial methods of solving, e.g. as in previous subsection, expanding in superalgebra generator series, or using abstract semigroup methods [19] and consider solutions of noninvertible equations as equivalence classes. The semi-transition functions entering in (5) are not more mutually inverse, and the functions $\Phi_{\beta\alpha}$ should now be determined not from (3) in which the left hand side is not well defined, but from the commutative diagram

$$\begin{array}{ccc} U_{\alpha\beta} & \xrightarrow{\varphi_\beta} & V_{\beta\alpha} \\ & \searrow \varphi_\alpha & \uparrow \Phi_{\beta\alpha} \\ & & V_{\alpha\beta} \end{array} \quad (6)$$

and the equation (5) following from it (see [20] for some examples of semisupermanifolds). They are also can be noninvertible and therefore the cocycle conditions should be modified not to use invertible functions only. Thus, instead of (3) and (4) we have

Conjecture 1. Semi-transition functions $\Phi_{\alpha\beta}$ of a semi-supermanifold satisfy the following relations

$$\Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta} \quad (7)$$

on $U_\alpha \cap U_\beta$ overlaps and

$$\Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta}, \quad (8)$$

$$\Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} = \Phi_{\beta\gamma}, \quad (9)$$

$$\Phi_{\gamma\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha} = \Phi_{\gamma\alpha} \quad (10)$$

on triple overlaps $U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma$ and

$$\Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\rho} \circ \Phi_{\rho\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta}, \quad (11)$$

$$\Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\rho} \circ \Phi_{\rho\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} = \Phi_{\beta\gamma}, \quad (12)$$

$$\Phi_{\gamma\rho} \circ \Phi_{\rho\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\rho} = \Phi_{\gamma\rho}, \quad (13)$$

$$\Phi_{\rho\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\rho} \circ \Phi_{\rho\alpha} = \Phi_{\rho\alpha} \quad (14)$$

on $U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma \cap U_\rho$.

We call (7)–(14) *tower relations*, and they satisfy identically in the standard invertible case [16], i.e. when the conditions (3) and (4) hold valid. The semi-supermanifolds defined above belong to a class of so called obstructed semi-supermanifolds in the following sense. We rewrite (3) and (4) as the infinite series

$$n = 1 : \quad \Phi_{\alpha\alpha} = 1_{\alpha\alpha}, \quad (15)$$

$$n = 2 : \quad \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\alpha} = 1_{\alpha\alpha}, \quad (16)$$

$$n = 3 : \quad = \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha} = 1_{\alpha\alpha}, \quad (17)$$

$$n = 4 : \quad = \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\delta} \circ \Phi_{\delta\alpha} = 1_{\alpha\alpha} \quad (18)$$

... ..

A semi-supermanifold is called *obstructed*, if some of the cocycle conditions (15)–(18) are broken. In some cases it can happen that starting from some $n = n_m$ all higher cocycle conditions hold valid.

Definition 6. *Obstructedness degree of a semi-supermanifold is a maximal n_m for which the cocycle conditions (15)–(18) are broken. If all of them hold valid, then $n_m \stackrel{\text{def}}{=} 0$.*

Ordinary manifolds (with invertible transition functions) have vanishing obstructedness, and the obstructedness degree for them is equal to zero, i.e. $n_m = 0$. The obstructed semi-supermanifolds may have non-vanishing ordinary obstruction which can be calculated extending the standard methods [14] to the non-invertible case. Therefore, using the obstructedness degree n_m , we have possibility to classify semi-supermanifolds properly.

We can compare semisupermanifolds with supernumbers as follows

Supernumbers	Semisupermanifolds
Ordinary nonzero numbers (invertible)	Ordinary manifolds (transition functions are invertible)
Supernumbers having nonvanishing number part (invertible)	Supermanifolds (transition functions are invertible)
Pure soul supernumbers without number part (noninvertible)	Obstructed semisupermanifolds (transition functions are noninvertible)

Let us consider a series of the selfmaps $e_{\alpha\alpha}^{(n)} : U_\alpha \rightarrow U_\alpha$ of a semi-supermanifold defined as

$$e_{\alpha\alpha}^{(1)} = \Phi_{\alpha\alpha}, \quad (19)$$

$$e_{\alpha\alpha}^{(2)} = \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\alpha}, \quad (20)$$

$$e_{\alpha\alpha}^{(3)} = \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\alpha}, \quad (21)$$

$$e_{\alpha\alpha}^{(4)} = \Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \Phi_{\gamma\delta} \circ \Phi_{\delta\alpha} \quad (22)$$

... ..

We will call $e_{\alpha\alpha}^{(n)}$'s *tower identities* (or *obstructors*). From (15)–(18) it follows that for ordinary supermanifolds all obstructors coincide with the usual identity map

$$e_{\alpha\alpha}^{(n), \text{ordinary}} = 1_{\alpha\alpha}. \quad (23)$$

So the obstructedness degree can be treated as a maximal $n = n_m$ for which tower identities differ from the identity, i.e. (23) is broken. The obstructors give the numerical measure of distinction of a semi-supermanifold from an ordinary supermanifold.

n -REGULARITY AND SEMI-COMMUTATIVE DIAGRAM TECHNIQUE

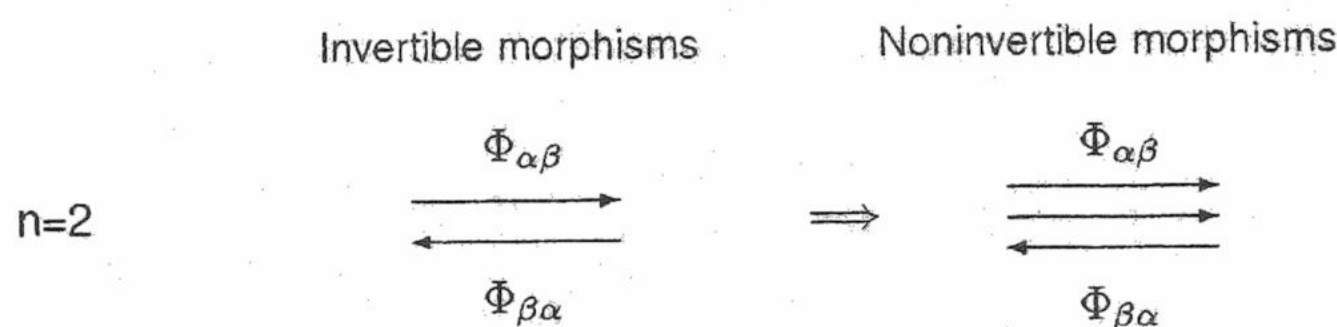
Let us generalize the above constructions to any set of noninvertible mappings. The extension of $n = 2$ cocycle given by (7) can be viewed as some analogy with regular [21] elements in semigroups or generalized inverses in matrix theory [22], category theory [23] and theory of generalized inverses of morphisms [24]. The relations (8)–(14) and with other n can be considered as noninvertible analogue of regularity for higher cocycles. Thus by analogy with (7)–(14) it is natural to formulate

Definition 7. An noninvertible mapping $\Phi_{\alpha\beta}$ is n -regular, if it satisfies the following conditions

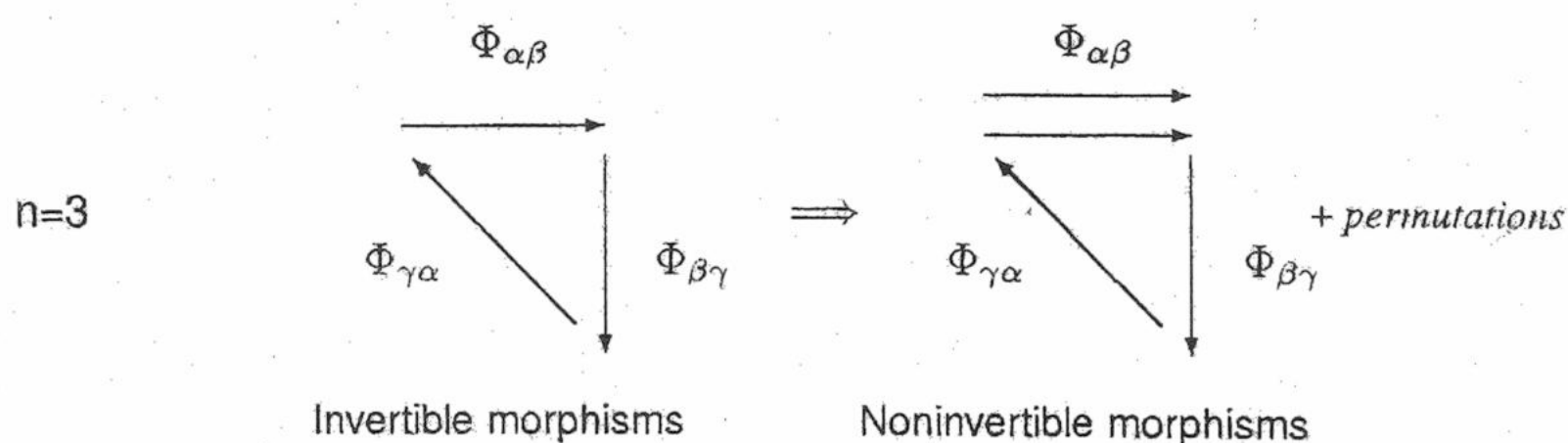
$$\overbrace{\Phi_{\alpha\beta} \circ \Phi_{\beta\gamma} \circ \dots \circ \Phi_{\rho\alpha} \circ \Phi_{\alpha\beta}}^{n+1} = \Phi_{\alpha\beta} + \text{permutations} \quad (24)$$

on overlaps $\overbrace{U_\alpha \cap U_\beta \cap \dots \cap U_\rho}^n$.

The formula (7) describes 3-regular mappings, the relations (8)–(10) correspond to 4-regular ones, and (11)–(14) give 5-regular mappings. Obviously that 3-regularity coincides with the ordinary regularity [19]. The higher regularity conditions change dramatically the general diagram technique of morphisms, when we turn to noninvertible ones. Indeed, the commutativity of invertible morphism diagrams is based on the relations (15)–(18), i.e. on the fact that the tower identities are ordinary identities (23). When morphisms are noninvertible (a semi-supermanifold has a nonvanishing obstructedness), we cannot “return to the same point”, because in general $e_{\alpha\alpha}^{(n)} \neq 1_{\alpha\alpha}$, and we have to consider “nonclosed” diagrams due to the fact that the relation $e_{\alpha\alpha}^{(n)} \circ \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta}$ is noncancellative now. Thus we propose the following intuitively consistent changing of the standard diagram technique for noninvertible morphisms. We consider a new arrow which corresponds to the additional multiplier and so for $n = 2$ we obtain



which describes the transition from (16) to (7) and presents the ordinary regularity condition for morphisms (see e.g. [23]). The most intriguing semicommutative diagram is the triangle one



which generalizes the cocycle condition (4).

By analogy we can write higher n -regularity semicommutative diagrams, which can be considered in framework of generalized categories [4, 9, 25].

CATEGORIES AND REGULARIZATION

Let $\mathfrak{M}$ be a generalized superspace covered by open sets U_α such that $\mathfrak{M} = \bigcup_\alpha U_\alpha$. Then we can describe a category whose objects are semi-charts $(U_\alpha, \varphi_\alpha)_{\alpha \in I}$ and whose morphisms are transition functions $\Phi_{\alpha,\beta} : V_{\beta,\alpha} \rightarrow V_{\alpha,\beta}$, where $\varphi_\alpha : U_\alpha \rightarrow V_\alpha \subset \mathbb{R}^{n|m}$ is a noninvertible morphism and I is a set of indices, and $V_{\alpha,\beta} = U_\alpha \cap \varphi_\alpha(U_{\alpha,\beta})$, and $U_{\alpha,\beta} = U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$. This leads to the following natural algebraization of the notion of semisupermanifold. Let $\mathcal{C}$ be an arbitrary category with equivalence [26]. We denote by $\mathcal{C}_0$ a class of objects and by $\text{hom}(\mathcal{C}) = \bigcup_{X,Y \in \mathcal{C}_0} \text{hom}_{\mathcal{C}}(X,Y)$ a class of all morphisms of $\mathcal{C}$. By an equivalence in $\mathcal{C}$ we mean a class of morphisms $\text{hom}'(\mathcal{C}) = \bigcup_{X,Y \in (\mathcal{C}_0)} \text{hom}'_{\mathcal{C}}(X,Y)$ where $\text{hom}'_{\mathcal{C}}(X,Y)$ is a subset of $\text{hom}_{\mathcal{C}}(X,Y)$. Let $X = (X_1, \dots, X_n)$ be a sequence of objects of $\mathcal{C}$.

Definition 8. A sequence of morphisms

$$X_1 \xrightarrow{\Phi_1} X_2 \xrightarrow{\Phi_2} \dots \xrightarrow{\Phi_{n-1}} X_n \xrightarrow{\Phi_n} X_1 \quad (25)$$

such that there is an (endo-)morphism $e_{X_1}^{(3)} : X_1 \rightarrow X_1$ defined uniquely by the following equation

$$e_{X_1}^{(n)} := \Phi_n \circ \dots \circ \Phi_2 \circ \Phi_1 \quad (26)$$

and subjects to the following relation

$$\Phi_1 \circ \Phi_n \circ \dots \circ \Phi_2 \circ \Phi_1 = \Phi_1$$

is said to be a regular n -cycle on C and it is denoted by $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_n)$.

The (endo-) morphisms $e_{X_i}^{(n)} : X_i \rightarrow X_i$ corresponding for $i = 2, \dots, n$ are defined by a suitable cyclic permutation of above sequence (and they are some analogs of obstructors $e_{\alpha\alpha}^{(n)}$ introduced above for semisupermanifolds). If

$$X_1 \xrightarrow{\Phi'_1} X'_2 \xrightarrow{\Phi'_2} \dots \xrightarrow{\Phi'_{n-1}} X'_n \xrightarrow{\Phi'_n} X_1$$

is an another n -tuple of morphisms such that

$$e_{X_1}^{(n)} := \Phi'_n \circ \dots \circ \Phi'_2 \circ \Phi'_1,$$

then we assume that X'_i is equivalent to X_i , for $i = 2, \dots, n$. The morphism e_X is said to be an *obstruction* of X . The mapping $e : X \in C_0 \rightarrow e_X \in \text{hom}(X, X)$ is called a regular n -cycle obstruction structure on C . We denote by $C_n(C)$ the collection of all regular n -cycles on C . This collection is said to be regularization of C .

Definition 9. If the regularization $C_n(C)$ exists for a given category C , then the category C is said to be a category with regularization.

We note that the regularization procedure is not unique. For a given category C we can find several regularizations $C_n(C)$. The classification of all possible regularizations is a problem. Let $e : X \in C_0 \rightarrow e_X \in \text{hom}(X, X)$ and $e' : X \in C_0 \rightarrow e'_{X'} \in \text{hom}(X', X')$ be two regular n -cycles obstructors in C . Then the morphism $\alpha : X \rightarrow X'$ such that

$$\alpha \circ e_X^{(n)} = e'_{X'}^{(n)} \circ \alpha$$

is said to be a regular n -cycle obstruction morphism from e to e' . We denote by $\text{hom}_{C_n(C)}(X, X')$ the set of all these morphisms from X to X' . If $\alpha : X \rightarrow X'$ and $\beta : X' \rightarrow X''$ are two n -cycle morphisms, then the composition $\beta \circ \alpha : X \rightarrow X''$ is also a n -cycle morphism. This means that $\text{hom}(C_n(C)) = \cup_{X, Y \in C_0} \text{hom}_{C_n(C)}(X, Y)$ is an equivalence in the category C .

REGULARIZATION OF FUNCTORS AND YANG-BAXTER EQUATION

Let $C = C(I, \otimes)$ be a monoidal category [26], where I is the unit object and $\otimes : C \times C \rightarrow C$ is the monoidal product. If the following relation

$$e_X \otimes e_{X'} = e_{X \otimes X'}. \quad (27)$$

holds true, then the monoidal product of two regular n -cycles $X_1, \dots, X_n$ and $X'_1, \dots, X'_n$ with obstructors e_{X_1} and $e_{X'_1}$ respectively, is the regular n -cycle $X_1 \otimes X'_1, \dots, X_n \otimes X'_n$ with the obstruction $e_{X \otimes X'}$. Hence it is obvious that the corresponding regularization $C_n(C)$ is monoidal.

The morphisms $e_X^{(n)}$ can be used to regularize the notion of functor. All the standard definitions of functor [26] are not changed, but *preservation of identity* is replaced by *requirement of preservation of morphisms* $e_X^{(3)}$. Let C and C' be two monoidal categories with regularizations $C_n(C)$ and $C_n(C')$, respectively.

Definition 10. A functor $F : C \rightarrow C'$ such that

$$F(e_X) = e_{F(X')} \quad (28)$$

is said to be *regular*.

Lemma 1. If $\alpha : X \rightarrow X'$ is a n -cycle morphism in C , then $F(\alpha) : F(X) \rightarrow F(X')$ is a n -cycle morphism in C' .

In the same manner we can "regularize" the natural transformations [26]. Let $B = \{B_{X,X'} : X \otimes X' \rightarrow X' \otimes X\}$ be a braiding in the category $\mathcal{C}$ [27]. If all braidings $B_{X,Y}$ are regular n -cycle morphisms, then we say that it is a *regular n -cycle braiding*, which means

$$B_{X,X'} \circ e_{X \otimes X'} = e_{X' \otimes X} \circ B_{X,X'},$$

for $X, X' \in \mathcal{C}_0$. We use the notation

$$B_{X,Y,Z}^{(1)} = B_{X,Y} \otimes e_Z, \quad B_{X,Y,Z}^{(2)} = e_X \otimes B_{Y,Z}.$$

Lemma 2. If $B_{X,Y}$ and $B_{Y,Z}$ are regular n -cycle morphisms, then the prebraiding relations $B_{X \otimes Y, Z} = B_{X,Y,Z}^{(1)} \circ B_{X,Y,Z}^{(2)}$, $B_{X, Y \otimes Z} = B_{X,Y,Z}^{(2)} \circ B_{X,Y,Z}^{(1)}$ are also n -cycle morphisms.

This lemma allows us to "regularize" the Yang–Baxter equation in the following way [28, 2]

$$B_{Y,Z,X}^{(1)} \circ B_{Y,X,Z}^{(2)} \circ B_{X,Y,Z}^{(1)} = B_{Z,X,Y}^{(2)} \circ B_{X,Z,Y}^{(1)} \circ B_{X,Y,Z}^{(2)}. \quad (29)$$

The solutions of "noninvertible" Yang–Baxter equation (29) can be e.g. found by application of the semigroup endomorphism methods [29].

REGULARIZATION OF ALGEBRAS, COALGEBRAS, MODULES AND COMODULES

Let $C_n(\mathcal{M})$ be regularization of a given monoidal category $\mathcal{M}$. It is known that an associative algebra in the category $\mathcal{C}$ is an object $\mathcal{A}$ of this category such that there is an associative multiplication $m : \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ which is also a morphism of this category. If the multiplication is in addition a regular n -cycle morphism, then the algebra $\mathcal{A}$ is said to be a *regular n -cycle algebra*. This means that we have the relation

$$m \circ (e_{\mathcal{A}} \otimes e_{\mathcal{A}}) = e_{\mathcal{A}} \circ m. \quad (30)$$

One can define a regular n -cycle coalgebra or bialgebra in a similar way. A comultiplication $\Delta : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A} \otimes \mathcal{A}$ can be regularized according to the relation

$$\Delta \circ e_{\mathcal{A}} = (e_{\mathcal{A}} \otimes e_{\mathcal{A}}) \circ \Delta. \quad (31)$$

Let ${}_{\mathcal{A}}\mathcal{C}$ be a category of all left $\mathcal{A}$ -modules, where $\mathcal{A}$ is a bialgebra. For the regularization $C_n({}_{\mathcal{A}}\mathcal{C})$ of the $\mathcal{A}$ -module action $\rho_M : \mathcal{A} \otimes M \rightarrow M$ we use the following formula

$$\rho_M \circ (e_{\mathcal{A}} \otimes e_M) = e_M \circ \rho_M, \quad (32)$$

where $\rho_M : \mathcal{A} \otimes M \rightarrow M$ is the left module action of $\mathcal{A}$ on M . The monoidal operation in this category is given as the following tensor product of $\mathcal{A}$ -modules

$$\rho_{M \otimes N} := (id_M \otimes \tau \otimes id_N) \circ (\rho_M \otimes \rho_N) \circ (\Delta \otimes id_{M \otimes N}), \quad (33)$$

where $\tau : \mathcal{A} \otimes M \rightarrow M \otimes \mathcal{A}$ is the twist, i.e. $\tau(a \otimes m) := m \otimes a$ for every $a \in \mathcal{A}, m \in M$.

Lemma 3. For the tensor product of module actions we have the following formula

$$\rho_{M \otimes N} \circ (e_{\mathcal{A}} \otimes e_{M \otimes N}) = e_{M \otimes N} \circ \rho_{M \otimes N}. \quad (34)$$

This lemma means that the tensor product of two module actions satisfy our regularity condition, if and only if these two actions also satisfy the regularity condition (32). Observe that there is also a category $\mathcal{C}^{\mathcal{A}}$ of right $\mathcal{A}$ -comodules, where $\mathcal{A}$ is an algebra. We can regularize this category in the following way. For the coaction we have

$$\rho \circ e_{\mathcal{A}} = (e_M \otimes e_{\mathcal{A}}) \circ \rho, \quad (35)$$

and

$$\rho_{M \otimes N} := (id_M \otimes m_{\mathcal{A}}) \circ (id_M \otimes \tau \otimes id_N) \circ (\rho_M \otimes \rho_N), \quad (36)$$

where $\tau : M \otimes N \rightarrow N \otimes M$ is the twist, $m_{\mathcal{A}} : \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ is the multiplication in $\mathcal{A}$.

CONCLUSIONS

We can conclude that investigation of noninvertible extension of many abstract structures can be done in common general way: by introduction of obstructors (or n -cycles) e which are analogs of units, and they are equal to identity in the invertible case. In search of possible interpretations we can observe that "In e " plays the role of first "fundamental group" for "space" of categories and vanishes for invertible morphisms, while its difference from "zero" can be treated as nontrivial "noninvertible topology" of such "space". So further study of this noninvertible extension approach for categories and structures would be worthwhile and important for more deep understanding of noninvertibility and its applications.

REFERENCES

1. Duplij S. // *On semi-supermanifolds*. Pure Math. Appl. 1998. V. 9. № 3-4. P. 283–310.
2. Duplij S., Marcinek W. // *Higher regularity properties of mappings and morphisms*. Wrocław, 2000. 12 p. (Preprint / Univ. Wrocław; IFT UWr 931/00, math-ph/0005033).
3. Baez J. C. // *An introduction to n-categories*. Riverside, 1997. 34 p. (Preprint / Univ. California, q-alg/9705009).
4. Baez J. C., Dolan J. // *Higher-dimensional algebra III: n-categories and the algebra of opetopes*. Riverside, 1997. 60 p. (Preprint / Univ. California, math/9702014).
5. Baez J. C., Dolan J. // *From finite sets to Feynman diagrams*. Riverside, 2000. 30 p. (Preprint / Univ. California, math.QA/0004133).
6. Baez J. C., Dolan J. // *Higher-dimensional algebra and topological quantum field theory*. J. Math. Phys. 1995. V. 36. № 11. P. 6073–6105.
7. Crane L., Yetter D. // *On algebraic structures implicit in topological quantum field theories*. Manhattan, 1994. 13 p. (Preprint / Kansas State Univ., hep-th/9412025).
8. Siehler J. // *Braided near-group categories*. Blacksburg, 2000. 8 p. (Preprint / Virginia Tech. Univ., math.QA/0011037).
9. Greenberg P., Sergiescu V. // *An acyclic extension of the braid group*. Comm. Math. Helv. 1991. V. 62. P. 185–239.
10. Bohm G., Nill F., Szlachanyi K. // *Weak Hopf algebras I: Integral theory and C*-structure*. Berlin, 1998. 40 p. (Preprint / Inst. Theor. Phys. FU, math.QA/9805104).
11. Nill F. // *Axioms for weak bialgebras*. Berlin, 1998. 48 p. (Preprint / Inst. Theor. Phys. FU, math.QA/9805104).
12. Li F. // *Weaker structures of Hopf algebras and singular solutions of Yang-Baxter equation*. Hangzhou, 2000. 6 p. (Preprint / Zhejiang Univ.).
13. Li F. // *Weak Hopf algebras and new solutions of Yang-Baxter equation*. J. Algebra. 1998. V. 208. № 1. P. 72–100.
14. Berezin F. A. *Introduction to Superanalysis*. Dordrecht. Reidel, 1987.
15. Leites D. *Supermanifold Theory*. Petrozavodsk. Math. Methods Sci. Invest., 1983.
16. De Witt B. S. *Supermanifolds*. Cambridge. Cambridge Univ. Press, 2nd edition. 1992. 407 p.
17. Kosinski A. A. *Differential Manifolds*. Boston. Academic Press, 1993. 243 p.
18. Duplij S. // *Noninvertibility and "semi-" analogs of (super) manifolds, fiber bundles and homotopies*. Kaiserslautern, 1996. 30 p. (Preprint / Univ. Kaiserslautern; KL-TH-96/10, q-alg/9609022).
19. Howie J. M. *Fundamentals of Semigroup Theory*. Oxford. Clarendon Press, 1995. 362 p.
20. Duplij S., Chursin M. // *On structure of smooth semisupermanifolds*. Kharkov State University Journal (Vestnik KSU), ser. Nuclei, Particles and Fields. 2000. V. 481. № 2(10). P. 22–26.
21. Hall T. E. // *On regular semigroups*. J. Algebra. 1973. V. 24. P. 1–24.
22. Rao C. R., Mitra S. K. *Generalized Inverse of Matrices and its Application*. New York. Wiley, 1971. 251 p.
23. Davis D. L., Robinson D. W. // *Generalized inverses of morphisms*. Linear Algebra Appl. 1972. V. 5. P. 329–338.
24. Nashed M. Z. *Generalized Inverses and Applications*. New York. Academic Press, 1976. 321 p.
25. Breen L. // *Braided n-categories and Σ -structures*. Paris, 1998. 25 p. (Preprint / Univ. Paris, math.CT/9810045).
26. MacLane S. *Categories for the Working Mathematician*. Berlin. Springer-Verlag, 1971. 189 p.
27. Joyal A., Street R. // *Braided monoidal categories*. North Ryde, New South Wales, 1986. 45 p. (Preprint / Macquarie University; Mathematics Reports 86008).
28. Duplij S., Marcinek W. // *On higher regularity and monoidal categories*. Kharkov State University Journal (Vestnik KSU), ser. Nuclei, Particles and Fields. 2000. V. 481. № 2(10). P. 27–30.
29. Li F. // *Solutions of Yang-Baxter equation in an endomorphism semigroup and quasi-(co)braided almost bialgebras*. Hangzhou, 1999. 17 p. (Preprint / Zhejiang Univ.).

ПОЛУСУПЕРМНОГООБРАЗИЯ, РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ И КАТЕГОРИЗАЦИЯ

С. А. Дуплий¹⁾, В. Марчинек²⁾¹⁾ Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина²⁾ Институт теоретической физики, университет Вроцлава, пл. Макса Борна 9, 50-204 Вроцлав, Польша

Предлагается подход, в рамках которого с учетом необратимости обобщаются супермногообразия на полусупермногообразия. Вводятся регуляризованные условия коцикла и "полукоммутативные диаграммы" для необратимых морфизмов. Определяются "препятственные морфизмы", которые измеряют отличие от коммутативного (обратимого) случая. Этот подход применяется к обобщению категорий, для которых аналогом "препятственных морфизмов" служат n -циклические морфизмы. Рассмотрены обобщения функторов и других объектов в моноидальных категориях, необратимый аналог уравнения Янга-Бакстера, а также необратимые обобщения (ко-) алгебр, левых и правых (ко-) модулей, тензорного произведения действия модулей.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: супермногообразие, полусупермногообразие, морфизм, моноидальная категория, функтор, регулярность, препятствие, уравнение Янга-Бакстера, коалгебра, комодуль.

УДК 538.945

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ
СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО НИОБИЯ

И. Н. Кудрявцев

Кафедра физики, Харьковский государственный автомобильно-дорожный технический университет,
61002 г. Харьков, ул. Петровского, 25; E-mail: aip@khadi.kharkov.ua
Поступила в редакцию 18 октября 2000 г.

Предложена теоретическая модель фононного спектра с дисперсией для описания термодинамических свойств фононной подсистемы ниобия без использования подгоночных параметров. Характерные частоты фононного спектра определяются через измеряемые экспериментально упругие постоянные кристаллической решетки. Выполнены численные расчеты фононной теплоемкости ниобия, изучен вклад акустических и оптических колебаний в широкой области температур. Определены средние значения частоты, длины волны, фазовой и групповой скорости, эффективной массы акустических и оптических фононов в зависимости от температуры. Изучены особенности динамики кристаллической решетки ниобия в области сверхпроводящего перехода.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ниобий, модуль Юнга, упругие постоянные, динамика решетки, акустические и оптические фононы, плотность фононных состояний, теплоемкость, сверхпроводимость

Изучение динамики кристаллической решетки сверхпроводящих металлов в теоретическом подходе, не использующем подгоночных параметров, с учетом дисперсии фононных мод представляется полезным для определения особенностей электрон-фононного взаимодействия и механизма спаривания носителей тока.

В качестве объекта исследования выбран ниобий, поскольку накоплены многочисленные экспериментальные данные по его структурным, упругим и термодинамическим свойствам как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях. Кроме того, ниобий имеет наивысшую среди простых металлов температуру сверхпроводящего перехода ($T_c = 9.25$ К), является сверхпроводником II рода, имеет дырочную проводимость и его удобно сравнивать с металлооксидными высокотемпературными сверхпроводниками.

Как известно, ниобий имеет кубическую объемноцентрированную решетку (структурный тип A2) с параметром $a = 3.30$ Å [1]. Элементарная ячейка включает два атома, что приводит к появлению в фононном спектре наряду с акустической и оптической ветви колебаний [2].

Поскольку характерные температуры изучаемых термодинамических функций ниобия ($T=1-250$ К) существенно ниже температуры его плавления ($T=2500$ °С), то применимо гармоническое приближение (см., напр., [2,3]). В этом случае закон дисперсии для двухатомной цепочки, состоящей из атомов одинаковой массы m , можно записать в виде:

$$\omega^2(k) = \frac{2\beta}{m} [1 \pm \cos(ka)], \quad 0 \leq k \leq \pi/(2a), \quad (1)$$

где β – коэффициент упругости решетки, который может быть выражен через модуль продольной упругости (модуль Юнга) $\beta = aE$ [4]. Знак «–» соответствует акустической, а знак «+» оптической ветви спектра. Предельная частота акустических фононов $\omega_D = \sqrt{2\beta/m}$ соответствует значению волнового числа $k = \pm \pi/(2a)$ на границе зоны Бриллюэна. Максимальная частота оптических фононов, соответствующая значению волнового числа $k = 0$, равна $\omega_m = \sqrt{2} \omega_D$. Поскольку массы атомов в цепочках совпадают, минимальная частота оптических фононов совпадает с предельной частотой акустических фононов $\omega_E = \omega_D$ и в спектре отсутствует запрещенная зона между акустической и оптической ветвями колебаний (см. рис.1).

В результате максимальная частота акустических фононов ω_D остается единственным свободным параметром в модели и может быть определена из экспериментально измеряемых значений упругих постоянных кристаллической решетки металла.

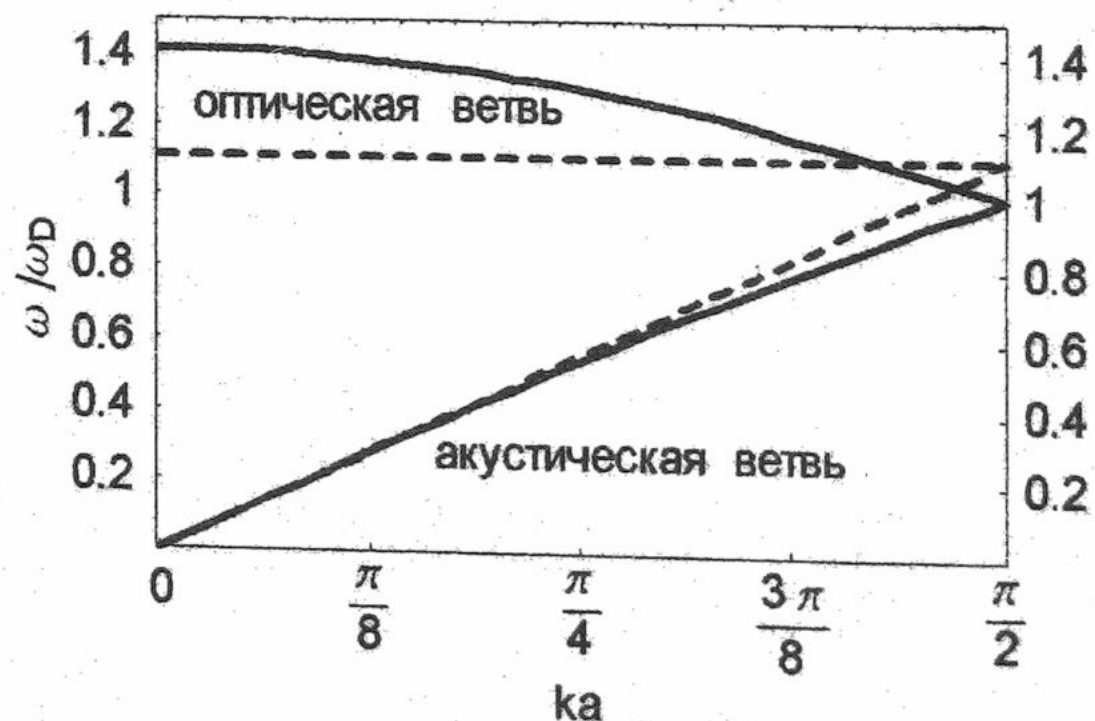


Рис.1. Сплошные кривые – дисперсионные зависимости приведенной частоты фононного спектра ω/ω_D , вычисленные по формуле (1). Штриховые линии соответствуют модели без дисперсии [5].

Модуль Юнга для твердого тела выражается через упругие постоянные C_{ij} по формуле [6]:

$$E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + C_{12}}. \quad (2)$$

Для отожженного ниобия высокой чистоты упругие постоянные равны [7]:

$$C_{11} = 246.5 \text{ ГПа}, \quad C_{12} = 134.5 \text{ ГПа}, \quad C_{44} = 28.7 \text{ ГПа}$$

и определенное по формуле (2) значение модуля Юнга равно $E = 152 \text{ ГПа}$. В соответствии с табличными данными [1] модуль Юнга для ниобия составляет $E = 156 \text{ ГПа}$, что отличается от вычисленного выше значения менее чем на 3 %. Соответствующие значения предельных частот ω_D и ω_m (а также температур $\Theta_D = \hbar \omega_D / k_B$ и $\Theta_m = \hbar \omega_m / k_B$) акустических и оптических фононов приведены в табл. 1 и для дальнейших расчетов выбираются их средние значения.

Таблица 1. Характерные частоты и температуры фононного спектра ниобия

$E, \text{ ГПа}$	$\omega_D, \text{ мэВ}$	$\Theta_D, \text{ К}$	$\omega_m, \text{ мэВ}$	$\Theta_m, \text{ К}$
152	16.8	195	23.8	275.7
156	17.0	197	24.0	278.5
Средние значения	16.9	196	23.9	277

Отметим, что полученные здесь значения ω_D и ω_m в точности совпадают со значениями резонансных частот фононного спектра ниобия, восстановленного по результатам неупругого рассеяния нейтронов [8].

Как показали выполненные численные расчеты по формуле (1), (см. рис.1) в области частот акустического спектра $\omega_D/2 \leq \omega \leq \omega_D$ имеется существенное отклонение от линейной зависимости $\omega(k)$ (штриховая линия), что свидетельствует о необходимости учета дисперсии высокочастотных акустических фононов, в особенности вблизи резонансной частоты ω_D . Как видно из рис.1, зависимость $\omega(k)$ для оптической ветви спектра также имеет существенно нелинейный характер.

Используя закон дисперсии (1), можно определить фазовые $v = \omega / k$ и групповые $u = \partial \omega / \partial k$ скорости, а также длины волн $\lambda = 2\pi / k$ и эффективные массы $m_{\text{eff}} = \hbar / (\partial^2 \omega / \partial k^2)$ фононов как функции частоты:

$$v^{(\pm)}(\omega) = \frac{a \omega}{\text{Arc cos} \left[\pm \left(\frac{\omega^2}{\omega_{D,E}^2} - 1 \right) \right]}, \quad u^{(\pm)}(\omega) = - \left(\frac{a \omega_{D,E}}{2} \right) \left[\pm \sqrt{2 - \frac{\omega^2}{\omega_{D,E}^2}} \right], \quad (3)$$

$$\lambda^{(\pm)}(\omega) = \frac{2\pi v^{(\pm)}(\omega)}{\omega}, \quad m_{\text{eff}}^{(\pm)}(\omega) = - \left(\pm \frac{4\hbar}{a^2 \omega} \right), \quad (4)$$

где знак «-» и индекс «D» относятся к акустической ($0 \leq \omega \leq \omega_D$), а знак «+» и индекс «E» - к оптической ($\omega_E \leq \omega \leq \omega_m$) ветви спектра. Из выражений (3) следует, что групповая и фазовая скорости оптических фононов имеют разные знаки, т.е. распространение фазы волны и перенос волной энергии происходят в противоположных направлениях. Это означает, что имеет место аномальная дисперсия оптических фононов. Отметим, что данный эффект характерен и для фононной подсистемы ВТСП $Y-Ba-Cu-O$ [9,10].

Получим выражения для плотности фононных состояний (ПФС) металла с учетом дисперсии фононов и наличия в спектре оптической ветви. Парциальные (для каждой ветви) фононные плотности состояний в случае трехмерного базиса, нормированные на единицу в пределах зоны Бриллюэна, определяются выражением

$$g(k) = (24 a^3 / \pi^3) k^2, \quad \int_0^{\pi/2a} g(k) dk = 1. \quad (5)$$

Используя связь $g(\omega) d\omega = g(k) dk$ и равенства (1), (5), можно получить частотные зависимости парциальных ПФС:

$$g^{(\pm)}(\omega) = \frac{48}{\pi^3 \omega_{D,E}} \text{Arc cos}^2 \left[\pm \left(\frac{\omega^2}{\omega_{D,E}^2} - 1 \right) \right] / \sqrt{2 - \frac{\omega^2}{\omega_{D,E}^2}}. \quad (6)$$

Здесь использована нормировка $\int_0^{\omega_D} g^{(-)}(\omega) d\omega = \int_{\omega_E}^{\omega_m} g^{(+)}(\omega) d\omega = 1$.

Обобщенная плотность состояний $G(\omega)$, включающая как акустические, так и оптические фононные моды для базиса, содержащего r атомов, может быть записана в виде

$$G(\omega) = \frac{1}{r} g^{(-)}(\omega) \chi(\omega_D - \omega) + \frac{r-1}{r} g^{(+)}(\omega) \chi(\omega_m - \omega) \chi(\omega - \omega_E), \quad \int_0^{\infty} G(\omega) d\omega = 1, \quad (7)$$

где $\chi(x)$ - функция Хевисайда. В частности, для ниобия $r = 2$.

Используя данную ПФС $G(\omega)$, можно вычислить полную энергию $E_{ph}(T)$, теплоемкость $C_{ph}(T) = \partial E_{ph}(T) / \partial T$, энтропию $S_{ph}(T)$ и другие термодинамические функции для фононной подсистемы ниобия без использования подгоночных параметров. В частности, молярная теплоемкость определяется выражением

$$C_{ph}(T) = 3nR \int_0^{\infty} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T} G(\omega)}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} d\omega, \quad (8)$$

где n - число атомов, входящих в химическую формулу, R - универсальная газовая постоянная, k_B - постоянная Больцмана. Численные расчеты фононной теплоемкости ниобия по формулам (6)-(8), с использованием характерных частот из табл. 1, представлены на рис. 2.

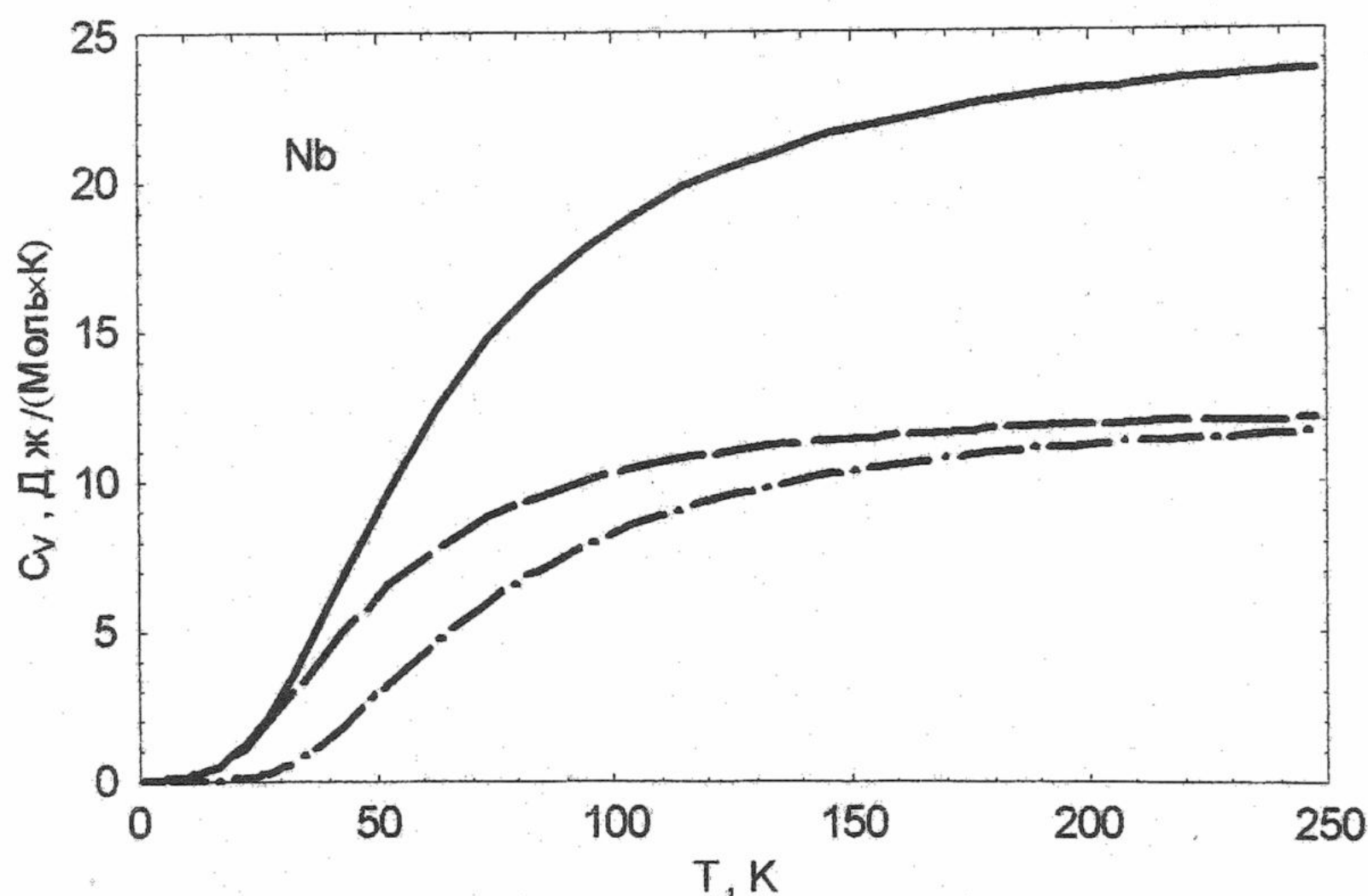


Рис. 2. Сплошная кривая - теплоемкость фононной подсистемы ниобия. Штриховая кривая - вклад акустических, штрихпунктирная кривая - вклад оптических фононов в теплоемкость.

Как видно из рис. 2, в области низких температур $T \leq 30$ К вклад оптических фононов в теплоемкость пренебрежимо мал, в области промежуточных температур $40 \text{ К} \leq T \leq 100 \text{ К}$ - становится существенным, а для температур $T \geq 120 \text{ К}$ - практически совпадает по величине с вкладом акустических фононов.

Используя рассчитанную в данной работе фононную теплоемкость $C_{ph}(T)$, можно однозначно выделить вклад электронной составляющей $C_e(T)$ в измеряемую экспериментально суммарную теплоемкость $C_{exp}(T)$ металла $C_e(T) = C_{exp}(T) - C_{ph}(T)$, из анализа которой можно получить детальную информацию о параметрах электронной подсистемы (как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях).

Измеряемые в эксперименте средние значения динамических характеристик акустических и оптических фононов $A = \{\omega, v, u, \lambda, m_{eff}\}$ в зависимости от температуры можно вычислить по формулам:

$$A^{(-)}(T) = \frac{1}{N^{(-)}(T)} \int_0^{\omega_D} \frac{A^{(-)}(\omega) g^{(-)}(\omega)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega, \quad N^{(-)}(T) = \int_0^{\omega_D} \frac{g^{(-)}(\omega)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega, \quad (9)$$

$$A^{(+)}(T) = \frac{1}{N^{(+)}(T)} \int_{\omega_E}^{\omega_m} \frac{A^{(+)}(\omega) g^{(+)}(\omega)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega, \quad N^{(+)}(T) = \int_{\omega_E}^{\omega_m} \frac{g^{(+)}(\omega)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega. \quad (10)$$

На рис. 3 и 4 представлены результаты численных расчетов средних значений частоты, длины волны, фазовой и групповой скоростей акустических и оптических фононов для ниобия с использованием формул (9), (10) и характерных частот фононного спектра из табл. 1.

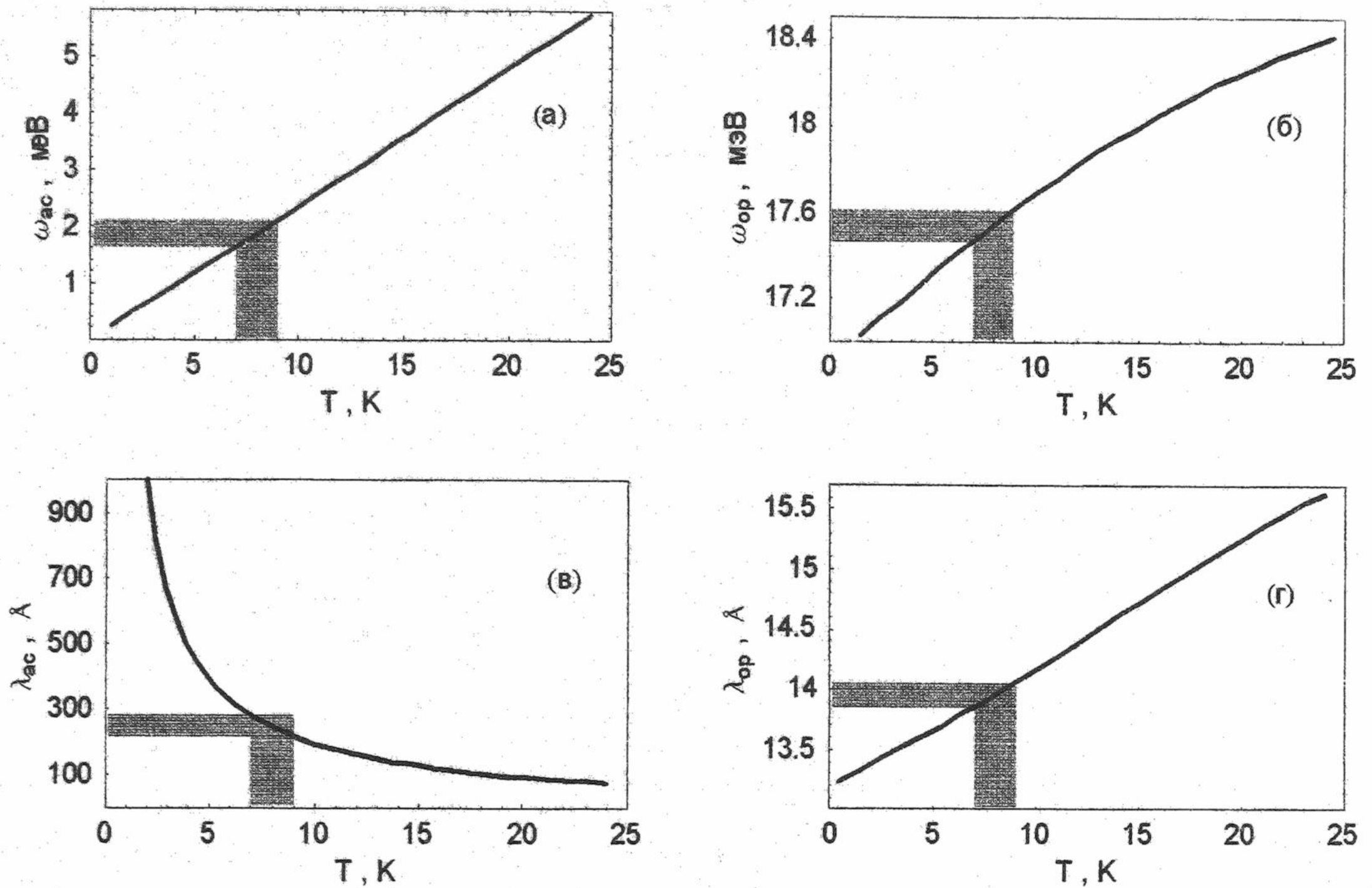


Рис. 3. Средняя частота и длина волны акустических (а), (в) и оптических (б), (г) фононов, соответственно, в области низких температур для ниобия. Заштрихованные сектора соответствуют области сверхпроводящего перехода.

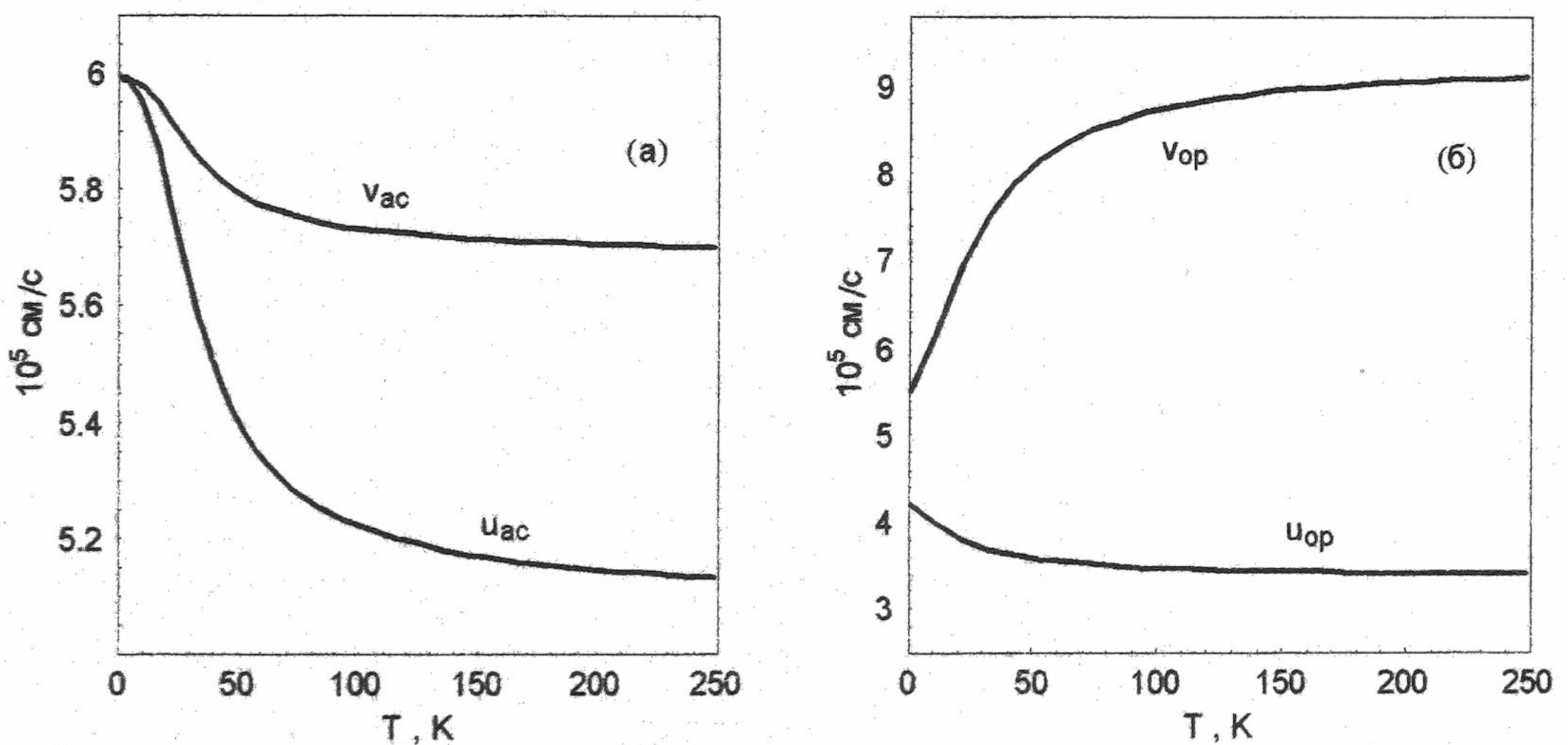


Рис. 4. Фазовая и групповая скорости акустических (а) и оптических (б) фононов, соответственно, в широкой области температур.

Средние значения динамических характеристик акустических и оптических фононов в области сверхпроводящего перехода ($T=7-9$ К) для ниобия приведены в табл. 2. Представляется интересным сравнить их с аналогичными параметрами электронной подсистемы для определения особенностей электрон-фононного взаимодействия и нахождения условий скейлинга для сверхпроводников различных классов.

Таблица 2. Основные динамические характеристики фононной подсистемы ниобия в области сверхпроводящего перехода

$T=7-9\text{ К}$	ω , мэВ	λ , Å	k , см ⁻¹	v , см/с	$ u $, см/с	$ m_{\text{eff}} /m_e$
Акустическая ветвь	1.6-2.1	220-280	$(2.2-2.9)\times 10^6$	6×10^5	6×10^5	2500-3100
Оптическая ветвь	17.5	14	4.5×10^7	6×10^5	4×10^5	160

В результате численных расчетов средних значений динамических характеристик фононов получено, что при любых температурах для ниобия выполняются следующие неравенства:

$$\omega_{\text{op}} > \omega_{\text{ac}}, \quad \lambda_{\text{ac}} > \lambda_{\text{op}}, \quad k_{\text{op}} > k_{\text{ac}}, \quad u_{\text{ac}} > |u_{\text{op}}|, \quad |m_{\text{eff}}^{\text{ac}}| > m_{\text{eff}}^{\text{op}}.$$

Представляет определенный интерес обнаруженное равенство фазовых скоростей акустических и оптических фононов в области сверхпроводящего перехода $T \approx T_c$, что соответствует условию фазового резонанса с обменом энергией между различными ветвями колебаний кристаллической решетки металла и может приводить к генерации гармоник с частотами $\omega = \omega_{\text{op}} + \omega_{\text{ac}}$, лежащими в оптической области фононного спектра.

Изучение взаимодействия фононной и электронной подсистем при этих условиях составляет предмет наших дальнейших исследований.

В заключение отметим, что в предложенном теоретическом подходе без использования подгоночных параметров удастся описать основные термодинамические свойства кристаллической решетки металла, изучить динамические характеристики акустических и оптических фононов в широком интервале температур и определить особенности фононной подсистемы металла в области сверхпроводящего перехода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Таблицы физических величин. Справочник под ред. И.К.Кикоина. - М.: Атомиздат, 1976, 1008 с.
2. Н.Б.Брандт, С.М.Чудинов. Электроны и фононы в металлах. - М.: Изд-во МГУ, 1990, 335 с.
3. Дж.Блейкмор. Физика твердого состояния. - М.: Металлургия, 1972, 488 с.
4. М.Борн, Х.Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. - М.: Изд-во ИЛ, 1958, 488 с.
5. И.Н.Кудрявцев, К.Э.Немченко, В.В.Деревянко и др. // ФНТ, 1991, т. 17, с. 739-745.
6. Дж.Рейсленд. Физика фононов. - М.: Мир, 1975, 365 с.
7. Р.Киффер, Х.Браун. Ванадий, ниобий, тантал. - М.: Мир, 1968.
8. Y. Nakagawa, A.D.B.Woods // Phys. Rev. Lett., 1963, v. 11, N 6, p. 271-274.
9. W.Reichardt // J. Low Temp. Phys., 1996, v. 105, No 3/4, p. 807.
10. И.Н.Кудрявцев // Вестник Харьковского университета, сер. физ. «Ядра, частицы, поля», 1999, N 453, вып. 3/7/, с. 36-42; I.N.Kudryavtsev // Report on XII Trilateral German-Russian-Ukrainian Seminar on HTS, 25-29 October 1999, Kiev, Ukraine.

PECULIARITIES OF THE LATTICE DYNAMICS FOR SUPERCONDUCTING NIOBIUM

I. N. Kudryavtsev

Department of Physics, Kharkov State Automobile & Highway Technical University, Ukraine;
61002 Kharkov, Petrovsky st., 25. E-mail: aip@khadi.kharkov.ua

Theoretical model of phonon spectrum with dispersion is proposed for description of thermodynamic properties of phonon subsystem of niobium without using fitting parameters. Characteristic frequencies of phonon spectrum are determined from the experimentally measured lattice elastic constants. Numerical calculations of phonon heat capacity of niobium are accomplished, the contribution of acoustic and optical vibrations is studied in wide temperature region. The average values of frequency, wave length, phase and group velocities, effective mass of acoustic and optical phonons are determined as the functions of temperature. The peculiarities of the lattice dynamics of niobium in superconducting transition region are analysed.

KEY WORDS: niobium, Young's modulus, elastic constants, lattice dynamics, acoustic and optical phonons, phonon density of states, heat capacity, superconductivity.

УДК 530.1:533.9

ФОРМИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

А.А. Бабаскин¹, Ю.В. Каменский², В.Г. Кириченко¹,
А.В. Киричок¹, В.М. Куклин¹, А.Н. Твардовский²

¹Харьковский национальный университет им.В.Н.Каразина,
физико-технический факультет, 61108, г. Харьков, пр.Курчатова, 31,

²НИИРИ, 61054, г. Харьков, ул. Ак.Павлова, 271

Поступила в редакцию 25 сентября 2000г.

Представлены результаты экспериментальных исследований поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии. Обнаружена периодическая модуляция поверхностной электронной плотности, характер которой подобен мелкомасштабной модуляции электронной плотности в пределах элементарной ячейки на поверхности графита. На основе экспериментальных данных и ранее развитой теории сделаны оценки характерных времен развития коллективных процессов образования крупномасштабных регулярных структур, подобных атомарной решетке монокристалла, в сравнении с временем образования последней.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: кристалл, поверхность, электронная плотность, диссипация, регулярные структуры, сканирующая туннельная микроскопия, графит, коллективные процессы.

Теория диссипативных структур, получившая в последние десятилетия значительное развитие, позволяет объяснить механизмы возникновения упорядоченных состояний (структур) в открытых неравновесных системах с диссипацией. Кристалл, являясь строго упорядоченной системой атомов, представляет собой весьма показательный пример диссипативной структуры, механизм возникновения которой до сих пор является предметом активного обсуждения. Кроме того, в последнее время особое внимание привлекают явления формирования регулярных пространственных структур с распределенными крупномасштабными дефектами. Во многих случаях топология структуры, образованной такими дефектами, оказывается подобной топологии основной структуры (кристаллической решетки).

Структуры кристаллического типа, которые могут быть описаны с помощью функции электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$, обладают, благодаря своей периодичности, четко выраженным узким линейчатым спектром в пространстве волновых чисел (k -пространстве). Возникновение линейчатых спектров с разрешенными и запрещенными зонами обусловлено трансляционной симметрией кристаллов и когерентными (коллективными) процессами распространения блоховских волн. Возникновение регулярных дефектов основной структуры приводит к появлению дополнительных линий в спектре, а подобие топологий основной структуры и дефектов проявляется в определенном самоподобии соответствующих участков спектра. Некоторая размытость спектральных линий обусловлена флуктуациями, порожденными тепловым движением атомов. Такие структуры с регулярными дефектами в определенном смысле можно считать самоподобными структурами. Значительную роль при формировании регулярных структур с четко выраженным линейчатым пространственным спектром играют диссипативные явления или процессы выноса (излучения) энергии из области взаимодействия. Именно в условиях слабого превышения потока энергии через систему над диссипативными процессами формируются пространственные структуры с характерным линейчатым пространственным спектром [1].

С точки зрения теории диссипативных структур, любая структура и, в частности, кристаллическая решетка формируется в результате некоторого процесса – первичной неустойчивости, обладающей определенным инкрементом (обратным характерным временем развития) и насыщающей нелинейностью. Эта нелинейность обусловлена отклонением от положения равновесия достаточно однородной подсистемы атомов, внутри которой преобладают двухчастичные взаимодействия с ближайшими соседними атомами. Очень часто нелинейность кубическая или выше (чаще всего соседних атомов больше, но их вклад во взаимодействие не всегда равноценный и именно поэтому доминируют лишь некоторые типы взаимодействий). На стадии первичной неустойчивости процесс формирования периодической структуры практически завершается, а затем происходит сужение спектра возмущений плотности из-за нелинейного механизма конкуренции возмущений (см. например, [2]).

Однако, кроме основного механизма взаимодействия элементов, в системе зачастую присутствует ряд и более слабых взаимодействий, проявляющих себя лишь в условиях, когда процесс построение основной (первичной структуры) близок к завершению. Эти вторичные неустойчивости обычно появляются на заключительной стадии процесса формирования первичной структуры, несколько искажая её. Именно это обстоятельство дает основания рассматривать процесс их возникновения как вынужденное нарушение симметрии, а сами нарушения – распределенными дефектами основной структуры. Подобные каскадные процессы обычно реализуются в средах с поглощением или с потерями на излучение энергии, где вне узкого интервала волновых чисел (пространственных масштабов) возмущения эффективно подавляются. В этом смысле возникающие весьма

регулярные структуры можно считать диссипативными. В средах с кубической нелинейностью (а такой тип нелинейности наиболее характерен для систем рассматриваемого типа), такие вторичные процессы носят характер модуляционных неустойчивостей резистивного или диссипативного типа. Анализ развития и насыщения таких неустойчивостей существенно облегчается из-за наличия малого параметра – отношения амплитуд вторичной структуры (модуляции) к амплитуде первичной.

Структура поверхности кристаллов зачастую характеризуется наличием поверхностных регулярных образований, линейные размеры которых на порядок и больше превышают соответствующие размеры элементарных ячеек в объеме и на поверхности кристалла [3]. Кроме того, проявляются неровности поверхностного слоя атомов в целом, в сравнении со слоями, лежащими в глубоко внутри кристалла. Твердое тело всегда стремится понизить свою поверхностную (а значит и общую) свободную энергию, образуя при этом на своих границах "горную" структуру типа холмов и долин [4]. Так, например, известны реконструированные поверхностные крупномасштабные регулярные образования на поверхности монокристалла кремния (так называемые, "7×7 ячейки", в которых располагаются 12 выпуклостей электронной плотности, соответствующих позициям отдельных атомов [5]). Поверхностные слои атомов, характер взаимодействия и соответствующее расположение которых отличаются от подобных параметров атомов, входящих в состав объемных слоев решетки, уже на масштабах, сравнимых с размерами элементарной ячейки, демонстрируют отклонения в регулярности [6]. В данной работе авторы отметили периодические отклонения в высоте изображения двух соседних атомов (точнее – положений локальных максимумов электронной плотности) на расстояниях значительно превышающих характерный размер элементарной ячейки, но какие-либо искажения границы в направлении нормали к поверхности образца ими не обсуждались. Отметим, что характерный продольный масштаб такой периодической модуляции электронной плотности на поверхности, судя по представленным в работе графическим данным, на порядок превышал межатомное расстояние в пограничном слое графита.

Формирование самоподобных структур, таким образом, является скорее общим правилом, чем исключением в тех случаях, когда первичный процесс и вторичная неустойчивость развиваются в узких интервалах в пространстве волновых чисел, а рост возмущений вне этих интервалов сильно подавлен. Другими словами, имеют место малые превышения над порогами как первичной так и вторичной неустойчивости, что позволяет ввести в рассмотрение характерные числа R_i ($i = 1, 2$) – параметры порядка, определить их критические значения $R_{cr,i}$, а затем показать, что обратные времена развития первичного и вторичного процессов, а также амплитуды основной структуры и её огибающей выражаются через соответствующие надпороговости $\varepsilon_i = (R_i - R_{cr,i})/R_{cr,i}$ (подробнее см. [1]).

В настоящей работе для анализа формирования регулярных структур на поверхности кристаллов применена модель образования самоподобных структур и проведено экспериментальное исследование с применением сканирующей туннельной микроскопии реальной атомной поверхности высоко ориентированного графита.

СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА

В данном разделе представлены экспериментальные результаты исследования поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии. Экспериментальные исследования проводили в воздушной среде при нормальных условиях на сканирующем туннельном микроскопе СТМ - 1. Разрешение в горизонтальной плоскости XU меньше $1,4\text{\AA}$, а по вертикали – $0,7\text{\AA}$. В качестве зонда использовались иглы, приготовленные способом электрохимического травления с вытяжкой.

В качестве объекта исследования использовался высоко ориентированный кристалл графита, приготовленный лабораторным путем. Очистка поверхности графита, являющаяся одновременно процессом образования реальной атомной поверхности кристалла слоистого типа, производилась скалыванием верхнего слоя кристалла непосредственно перед измерением.

На рис. 1 "а", "б", "с" представлены топографические изображения участков высоко ориентированного графита при различном увеличении, полученные сканированием в режиме стабилизации туннельного тока. Время сканирования участков – 10-20 сек. На рис. 1 "а" представлено изображение участка высоко ориентированного графита при максимальном увеличении. Наблюдаются упорядоченные ряды гексагональной структуры графита: шестиугольник состоит из атомов с разным уровнем локальной плотности состояний. Отметим, что параметры элементарной ячейки согласуются с данными, представленными в работах других авторов.

На отдельных участках образцов обнаружена периодическая модуляция поверхностной электронной плотности (крупномасштабная гофрировка), характер которой подобен (с коэффициентом подобия близким к 10) мелкомасштабной модуляции электронной плотности в пределах элементарной ячейки на поверхности графита (см. рис. 1 "б"). На другом образце (см. рис. 1 "с") была обнаружена поверхностная гофрировка, продольные линейные размеры которой на два порядка превосходят соответствующие размеры элементарной ячейки (размер вертикальной модуляции поверхности здесь лишь вдвое больший, чем в предыдущем случае, показанном на рис. 1 "б").

Отметим, что линейный масштаб модуляции поверхностной электронной плотности поверхности графита, обсуждаемый в работе [6], соответствует продольному масштабу гофрировки, изображенной на рис. 1 "б".

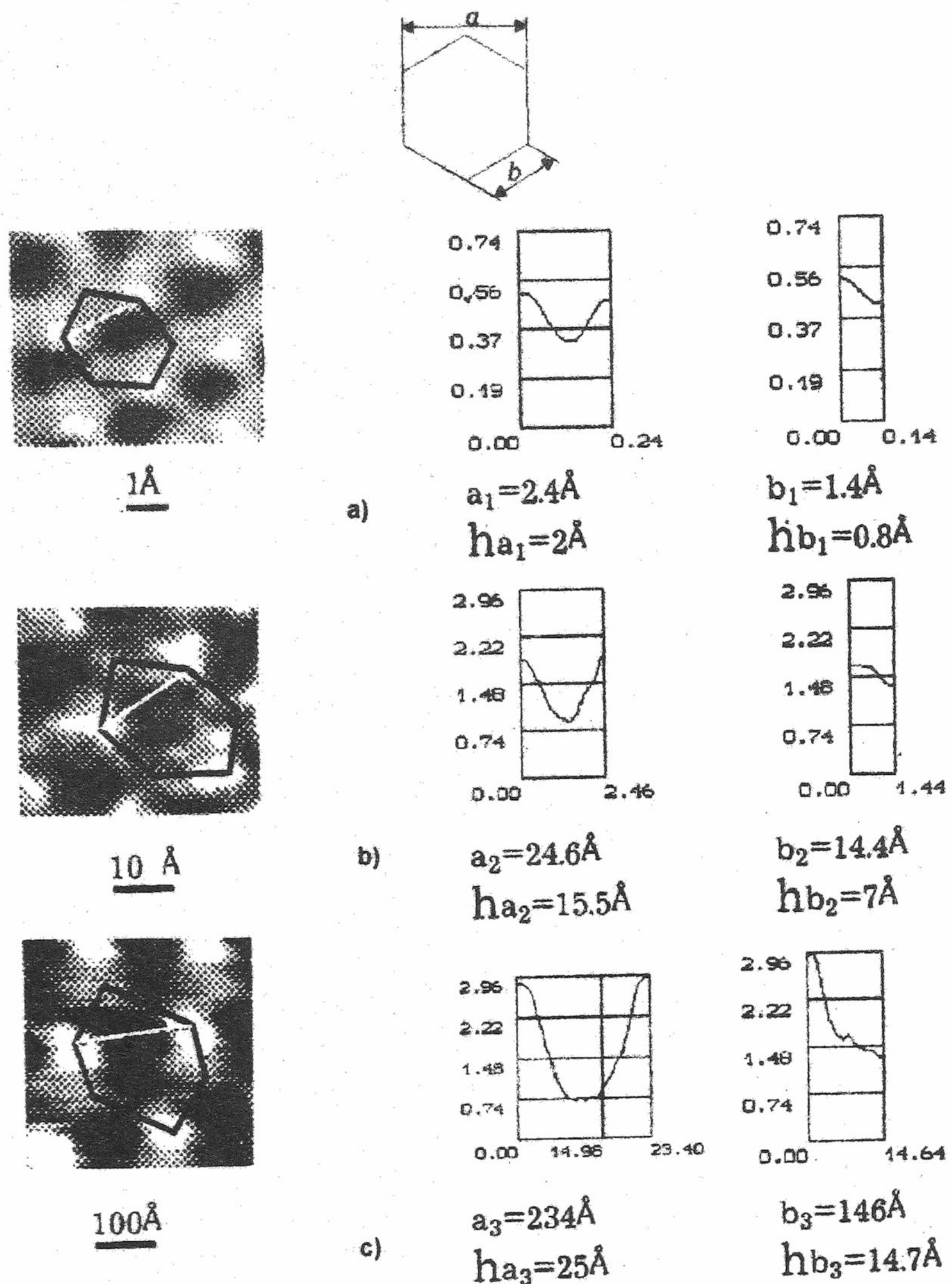


Рис. 1. Топографические изображения участков высоко ориентированного графита при различном увеличении, полученные методом сканирующей туннельной микроскопии.

(с коэффициентом подобия 10). Продольный масштаб гофрировки структуры, изображенной на рис. 1 "с", на порядок больше. Наблюдаемые отличия в характерных размерах модуляции поверхности графита связаны, видимо, с различными модификациями его структуры. Надо полагать, что в случае, изображенном на рис. 1 "b", представлен наиболее распространенная аллотропная форма углерода – графит с гексагональной структурой. Рис. 1 "с" соответствует, как можно предположить, реконструированной ромбоэдрической упаковке графита. Следует отметить, что ромбоэдрическая модификация графита наблюдается только в природном графите (так в цейлонском графите содержание ромбоэдрической фазы доходит до 30%), и отсутствует в графите, полученным искусственным путем. Важным в полученных экспериментальных данных является не только факт наличия вертикальной составляющей модуляции, а скорее, несомненное подобие первичной структуры – элементарной ячейки и вторичной структуры – модуляции поверхности электронной плотности, по крайней мере в случае, изображенном на рис. 1 "b". Отметим значительные периодические отклонения в высоте изображения не только двух соседних атомов (точнее – положений локальных максимумов электронной плотности) на расстояниях значительно превышающих характерный размер элементарной ячейки, но и пропорциональное увеличению коэффициента подобия при переходе к поверхностным структурам с крупномасштабной модуляцией

увеличение перепада высот при сканировании таких структур. Возможно, этот эффект обусловлен механизмом получения поверхности графита с помощью скола и формированием реконструированной крупномасштабной трехслойной ромбоэдрической модификации поверхностного слоя графита.

ФОРМИРОВАНИЕ САМОПОДОБНЫХ СТРУКТУР

Прежде чем перейти к обсуждению конкретных механизмов, объясняющих появление самоподобных структур на поверхности графита, описанных в предыдущем разделе, рассмотрим некоторые общие принципы, следующие из теории диссипативных структур.

Эволюционное уравнение в средах с преимущественной кубической нелинейностью, описывающее формирование пространственных структур может принимать вид

$$\hat{L}_k a_k \equiv \frac{\partial a_k}{\partial t} + \varepsilon(k) a_k = \iiint dk_1 dk_2 dk_3 a_{k_1} a_{k_2} a_{k_3} \delta(k - k_1 - k_2 - k_3) [V_{k,k_1,k_2,k_3} + \alpha S_{k,k_1,k_2,k_3}] + f_k, \quad (1)$$

где a_k – Фурье-образ возмущений (например, электронной плотности). Матричные элементы взаимодействия пространственных мод V_{k,k_1,k_2,k_3} и S_{k,k_1,k_2,k_3} определяются видом взаимодействия возмущений в системе и отвечают за формирование основной мелкомасштабной структуры и её модуляции – распределенного дефекта (при малых α), соответственно.

Величина $\varepsilon(k)$ имеет локальные максимумы вблизи $k = k_{oi}$ ($i = 1, 2, \dots$) и быстро убывает при удалении от этих точек, причем, если волновые векторы k заметно отличаются от k_{oi} , то $\varepsilon(k_{oi}) < 0$, что определяет сильное подавление таких возмущений, например, за счет эффектов выноса энергии фононами из области взаимодействия. Однако, этого мало для формирования пространственной структуры. Выбор системой ориентации происходит за счет наличия у функций $\sim V$ и S (или у соответствующего интеграла – потенциала Ляпунова, если последний существует) локальных минимумов в этих направлениях (точнее, для определенной ориентации связанных групп обратных векторов структуры – решетки). Таким образом, величины $|k_{oi}|^{-1}$ отвечают минимумам потенциала взаимодействия отдельных элементов структуры – атомов, а $\max \varepsilon(k_{oi})/V$ определяет плотность среды.

Оператор $\hat{L}_k$ определяет выбор вида спектра в k -пространстве, заданный типом двухчастичного взаимодействия. По существу, этот линейный оператор задает характерные значения длин волновых векторов (обратных характерному размеру) среды, обусловленные балансом сил притяжения и отталкивания при двухчастичном взаимодействии. Собственные значения оператора и длины собственных волновых векторов определим как $\varepsilon(k_{oi})$ и $|k_{oi}|$ соответственно.

Нелинейные слагаемые, пропорциональные V и S соответственно, позволяют учесть основные многочастичные взаимодействия, а именно взаимодействия ближайших соседей. По существу, практически не изменяя характерных равновесных размеров между узлами – атомами (и, тем самым, длин собственных векторов $|k_{oi}|$), нелинейные слагаемые, пропорциональные V и S , определяют их ориентацию, то есть формируют пространственную периодическую структуру – решетку.

Например, матричный элемент V_{k,k_1,k_2,k_3} может определять характеристики элементарной ячейки в объеме кристалла. Поверхностные эффекты будут определяться поправкой $\alpha S_{k,k_1,k_2,k_3}$, где α – коэффициент, характеризующий отношение поверхностных сил к силам объемного характера, а S_{k,k_1,k_2,k_3} – матричный элемент, учитывающий наличие границы. В ряде случаев, когда поверхностные эффекты достаточно ослаблены по сравнению с объемными ($\alpha \ll 1$), второе слагаемое заметно меньше первого. При этом, конструирование поверхностной структуры происходит по сценарию, определяемому взаимодействиями, характерными для внутренних областей кристалла. Однако, когда формирование тонкой структуры поверхностных слоев почти закончено, и спектральные амплитуды развитой поверхностной структуры достигают величин $\varepsilon_1/\min V$, где $\varepsilon_1 = \varepsilon(k_{oi})$, влияние на эволюцию системы более слабого физического механизма, обусловленного наличием границы, возрастает. При достижении интенсивности первичной структурой некоторых критических значений, возникает вторичная неустойчивость модуляционного типа. Очевидно, в таком случае должны существовать зависящие от $|a_k|^2$ некоторые характерные числа R (параметры порядка) и их критические (пороговые) значения R_{cr} .

Величина превышения над порогом (надпороговость) вторичной неустойчивости $\varepsilon_2 = (R_{2max} - R_{2cr})/R_{2cr}$ (где R_{2max} – величина, соответствующая стационарному состоянию при $\alpha = 0$) определяет не только характерные времена развития вторичного процесса, а также интенсивность и пространственные масштабы модуляции первичной структуры. При $\varepsilon_2 \approx 1$ максимальные преимущества будут иметь пространственные возмущения с векторами $k = k^*$, располагающимися вблизи векторов первичной мелкомасштабной структуры – решетки k_{oi} , причем $|k^* - k_{oi}|/k \sim \varepsilon_2$.

Отметим, что расположение в пространстве волновых чисел (так называемом, обратном пространстве)

всех максимумов вторичной неустойчивости в окрестности каждого из векторов основной решетки геометрически подобно расположению всей системы собственных волновых векторов основной решетки с коэффициентом подобия ϵ_2 . Это положение приводит к обратному значению данного коэффициенту подобия (ϵ_2^{-1}) в реальном пространстве для первичной и вторичной структур. Амплитуда модуляции первичной структуры также оказывается пропорциональной ϵ_2 . Можно ввести параметр, определяющий дефектность первичной – основной структуры – решетки, то есть, отношение интенсивности модуляции к интенсивности основной структуры

$$\beta = \frac{\sum |a_{k_i}|^2}{\sum |a_{k_{oi}}|^2}, \quad (2)$$

которое оказывается также пропорциональным ϵ (подробнее см. [1]).

Вернемся к обсуждению результатов экспериментов, описанных в предыдущем разделе. Несоответствие масштабов первичной структуры (периода решетки) в плоскостях, касательных к поверхности каждого из кристаллических слоев, приводит к появлению нормальных к этой поверхности напряжений вблизи границы кристалла. Эти силы, действующие как в вертикальном, так и в горизонтальном (то есть, параллельно макроскопической поверхности образца) направлениях могут при относительно низком уровне флуктуаций реализовать некоторое равновесное состояние.

Это равновесное состояние должно иметь определенную глубину вертикальной модуляции поверхности кристалла, чтобы совместить масштабы на поверхности и в объеме. Очевидно, формирование пространственной модуляции поверхностного слоя происходит в условиях воздействия более слабого физического механизма, поэтому роль флуктуаций, сопровождающих этот процесс, может оказаться существенной. В некоторых

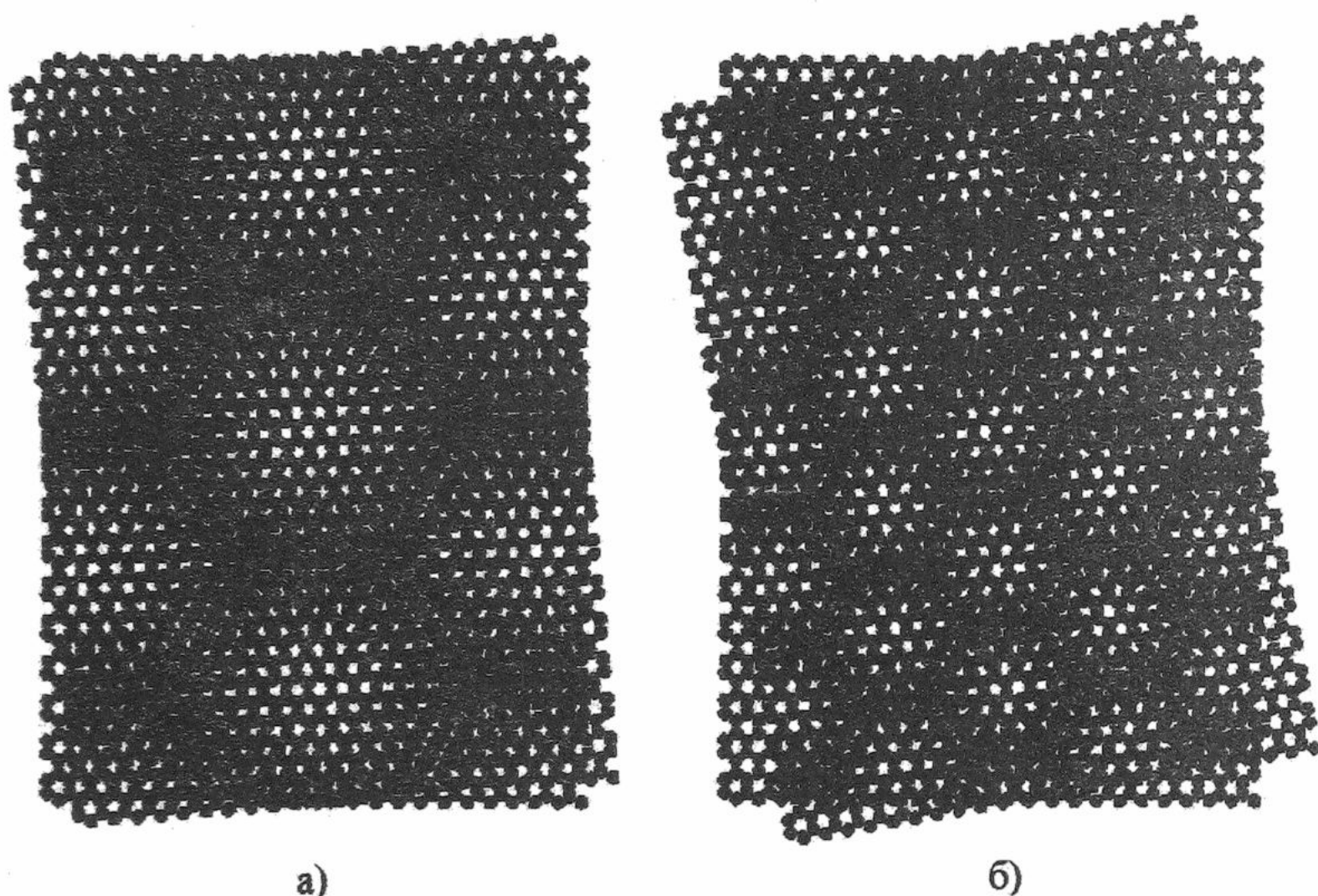


Рис. 2. Структуры Муара, возникающие при относительном повороте двух идентичных гексагональных решеток (графита) относительно друг друга на углы: а) 5° и б) 10° .

случаях флуктуации могут сорвать вторичную неустойчивость, и глубокая вертикальная модуляция поверхности может и не реализоваться.

Таким образом, в первом случае (рис. 1 "b") $\epsilon_2 \sim 10^{-1}$, а во втором (рис. 1 "c") $\epsilon_2 \sim 10^{-2}$. Характерное время формирования регулярной поверхностной структуры соответственно в 10 и 100 раз превышает время формирования атомной структуры графита. Можно сделать также вывод и о значении параметра α , который в первом случае порядка 10^{-1} , во втором – порядка 10^{-2} , при которой происходит рост зерен. Кристалл может сохранять идеальную структуру вплоть до размеров, сравнимых с линейным размером соответствующей сетки Франка выращенного иным способом монокристалла. При дальнейшем росте кристаллического зерна, в его объеме обязательно возникает дислокационная сетка Франка, имеющая пространственную структуру, по крайней мере, топологически подобную структуре элементарной ячейки кристалла [9, 10].

При формировании монокристалла возникающая регулярная периодическая микроструктура – атомная решетка кристалла – в нелинейной среде неустойчива. Развитие этой неустойчивости (т.е. вторичного, более слабого процесса по сравнению с процессом формирования решетки монокристалла) приводит к крупномасштабному регулярному смещению атомов от положений, характерных для совершенной решетки. В местах наибольшего отклонения атомов происходит пространственный сдвиг атомных рядов и появление характерных дефектов – дислокаций. Отношение масштабов элементарной ячейки кристалла и крупномасштабной дислока-

ционной сетки – сетки Франка, – порядка 10^{-4} . Следовательно, $\varepsilon_2 \sim 10^{-4}$. Следует также ожидать, что характерное время формирования сетки Франка в 10^4 раз превышает время формирования регулярной атомной решетки. В той же пропорции находятся и силы взаимодействия, формирующие мелкомасштабную и крупномасштабную структуры.

Еще одним возможным механизмом образования структур на поверхности кристалла являются так называемые структуры Муара (Moire structures). Такие структуры возникают в результате наложения двух одинаковых периодических решеток друг на друга с последующим поворотом одной из них на небольшой угол θ относительно другой (рис.2). При этом период крупномасштабной структуры полностью определяется углом поворота θ – с уменьшением угла θ период растет. Таким образом, если в силу каких-то причин (например, из-за выхода на поверхность достаточного количества дислокаций одного знака) поверхностный слой кристалла развернут на небольшой угол относительно следующего за ним слоя, то на поверхности кристалла может возникнуть так называемая реконструированная решетка, т.е. решетка, обладающая той же топологией, что и основная, но имеющая больший период, зависящий от угла разворота.

ВЫВОДЫ

В работе приведены экспериментальные результаты исследований поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии. Обнаруженная периодическая модуляция поверхностной электронной плотности, характер которой в одном случае полностью подобен мелкомасштабной модуляции электронной плотности в пределах элементарной ячейки на поверхности графита с коэффициентом подобия равным 10, а во втором случае можно говорить о подобии в топологическом смысле (коэффициент подобия вдоль границы кристалла порядка 100). Можно предположить, что в первом случае реализована реконструированная поверхность графита с гексагональной структурой. Второй случай соответствует, как можно предположить, реконструированной ромбоэдрической упаковке графита. На основе экспериментальных данных сделано предположение о коллективной природе рассмотренных явлений. На основе развитой теории формирования самоподобных регулярных структур сделаны оценки характерных времен развития коллективных процессов образования крупномасштабных регулярных структур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuklin V.M., Kirichok A.V. Distributed defects in mature dissipative structures. *Phys. Scripta*, 1995, v.52, pp.492-497.
2. Kirichok A.V. and Kuklin V.M.,. Allocated imperfections of developed convective structures. *Phys. Chem. Earth (A)*, 1999, v.24, no. 6, pp. 533-537.
3. Getting A.V. *Uspekhi Fiz. Nauk (Russia)* 11, 1, 1991.
4. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Т.1. Термодинамическая и общая кинетическая теория. М.: Мир, 1978, 806 с.; Christian J.W. *Transformations in metals and alloys*. Pergamon Press, 1975.
5. Ramstad A., Brocks G., Kelly P.J. Theoretical study of Si (100) surface reconstruction. *Phys. Rev.* V51, N20, p.14504 (1995).
6. Алекперов С.Д., Васильев С.И., Леонов В.Б., Панов В.И., Семенов А.Э. Исследование асимметрии атомного изображения поверхностной решетки графита методом СТМ. Доклады АН СССР, Физика, 1989, т.307, №5, с. 1104-1109.
7. Kamensky Yu., Limansky A., Limanskaya O. Imaging of oligonucleotides and DNA by Scanning Tunneling Microscopy. "Nano-2" Second International Conference on Nanometer Scale Science and Technology Aug. 2-6, 1993.
8. Уманский Я.С., Скаков Ю.Д. Физика металлов. М.: Атомиздат, 1978, 352 с.
9. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967, 643с.; Fridel J. *Dislocations*. Pergamon Press 1964.
10. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: Изд. Иностран. Лит. 1963, 247с.

THE FORMATION OF THE ALLOCATE DEFECTS ON THE CRYSTAL SURFACES

A.A. Babaskin*, Yu.V. Kamensky**, V.G. Kirichenko*,
A.V. Kirichok*, V.M. Kuklin*, A.N. Tvardovsky

*Kharkov National University, Department of Physics and Technology, 4 Svobody Sq., 610077 Kharkov 77, Ukraine

**SDIRM, 271, Ak.Pavlova str, 61054, Kharkov, Ukraine

The results of experimental investigation of graphite surface by scanning tunneling microscopy are presented. The periodic modulation of surface electron density is founded. The character of this modulation is similar to the fine-scale modulation of electron density in crystal cell on graphite surface. On the base of experimental data and earlier developed theory the values of character times of the collective processes formed large-scale regular structures similar mono-crystal cell are carried.

KEY WORDS: crystal, surface, electron density, dissipation, regular structures, scanning tunneling microscopy, graphit, collective processes.

УДК 533.951

САМОВОЗДЕЙСТВИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛА С МАГНИТОАКТИВНОЙ ПЛАЗМОЙ КОНЕЧНОГО ДАВЛЕНИЯ

Н.А. Азаренков, Ю.А. Акимов, А.В. Гапон

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, физико-технический факультет.
61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31.

E-mail: azarenkov@pet.kharkov.ua

Поступила в редакцию 27 октября 2000 г.

Рассмотрен нелинейный процесс самовоздействия потенциальных поверхностных волн (ПВ) на границе металла с магнитоактивной плазмой конечного давления, распространяющихся перпендикулярно постоянному внешнему магнитному полю. Получено нелинейное дисперсионное уравнение и нелинейное уравнение Шредингера для огибающей волны. Решение последнего исследовано на устойчивость относительно возмущений огибающей волнового пакета.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: самовоздействие, гармоника, нелинейное дисперсионное уравнение, нелинейное уравнение Шредингера.

Свойства поверхностных волн в плазменно-металлических структурах в последнее время являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Интерес к этим структурам связан с необходимостью решения многих задач плазменной и полупроводниковой электроники, проблемы лимитера и дивертора в тороидальных приборах УТС, создания источников плазмы и др. Во многих случаях приходится иметь дело с волновыми процессами конечной амплитуды в ограниченных структурах, когда линейная теория становится несправедливой [1-3]. Дисперсионные свойства, топография полей и нелинейное взаимодействие этих волн в плазменно-металлических структурах с холодной плазмой и внешним магнитным полем, направленным вдоль границы раздела, изучены в [4,5]. Имеются в виду ПВ, обусловленные коллективными возбуждениями в плазме, частота которых значительно ниже частот собственных электронных возмущений в металле.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим нелинейный процесс самовоздействия потенциальных поверхностных волн конечной амплитуды, распространяющихся на границе металла с плазмой конечного давления перпендикулярно внешнему магнитному полю, направленному поперек границы раздела.

Плазма предполагается горячей и занимает полупространство $x > 0$ и в плоскости $x = 0$ ограничена идеально проводящей металлической поверхностью. Граница раздела между металлом и плазмой предполагается резкой. Модель резкой границы справедлива в случае, когда размеры переходной области значительно меньше глубины проникновения поля ПВ. Внешнее постоянное магнитное поле $\vec{H}_0$ направлено вдоль оси x рис. 1.

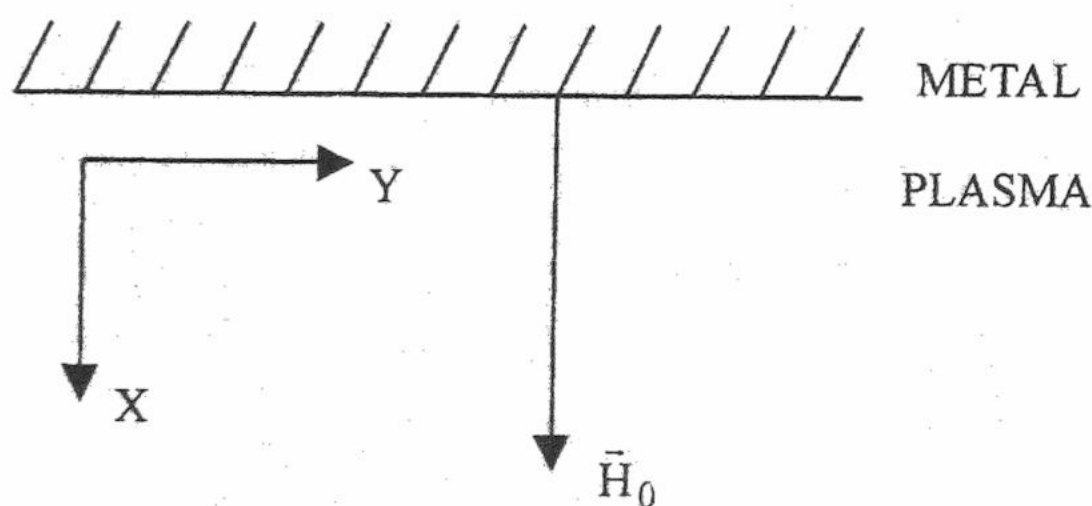


Рис. 1. Геометрия задачи.

Дисперсионные свойства, пространственное распределение потенциала этих волн в линейном по амплитуде поля приближении изучены в [4]. Согласно [4], рассматриваемые ПВ существуют в частотном диапазоне $\omega^2 > \omega_{ce}^2$, и необходимым условием их существования является конечность тепловой скорости электронов, поэтому рассмотрим самовоздействие ПВ в случае $\omega_{ce}^2 < \omega^2 \ll \omega_{pe}^2$ (ω_{ce} , ω_{pe} – электронные циклотронная и плазменная частоты). В этом диапазоне частот динамика ПВ определяется электронными движениями, поэтому вкладом ионов в самовоздействие можно пренебречь.

Для описания нелинейного процесса самовоздействия магнито-плазменных ПВ в структуре плазма-металл исходим из уравнений квазигидродинамики для электронных движений в поле ПВ и уравнения Пуассона [6]

$$\Delta\varphi = 4\pi en_e,$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \operatorname{div}(n_e \bar{V}_e) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{V}_e}{\partial t} + (\bar{V}_e \nabla) \bar{V}_e = \frac{e}{m_e} \nabla \varphi - \frac{e}{m_e c} [\bar{V}_e, \bar{H}] - V_{Te}^2 \frac{\nabla n_e}{n_e},$$

где $\varphi, \bar{V}_e, m_e, n_e, V_{Te}$ - потенциал волны, гидродинамическая скорость, масса, плотность и тепловая скорость электронов.

При исследовании нелинейных свойств ПВ воспользуемся приближением слабой нелинейности [1,3]. Это приближение справедливо при достаточно малых амплитудах волн, т.е. когда малым является параметр нелинейности $\mu = eA / (m_e V_{Te}^2) \ll 1$ [3]. В этом случае решение системы уравнений (1) можно представить в виде разложения в ряд по гармоникам частоты ω и волнового числа k_2 нелинейной ПВ

$$C(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^n C_j(x) \exp(i\psi_j),$$

где $C_j(x)$ - амплитуда волнового возмущения, $\psi_j = j(k_2 y - \omega t)$.

Согласно результатам работ [7,8], в приближении слабой нелинейности отношение амплитуд $j+1$ и j -гармоник пропорционально выражению $C_{j+1}/C_j \approx \mu [D_{j+1} - D_j]^{-1}$, где $D_j = D(k_2 j, \omega_j)$ - дисперсионное уравнение, связывающее частоту и волновое число j -й гармоники. В случаях, когда $j+1$ и j -гармоники являются несобственными волнами системы либо одна из них собственная, другая несобственная, отношение $C_{j+1}/C_j \approx \mu \ll 1$. В этих случаях эффективность генерации высшей гармоники мала. Резонансная генерация второй гармоники эффективна при выполнении условий пространственно-временного синхронизма $k_2(2\omega) = 2k_2(\omega)$, $\omega + \omega = 2\omega$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Частота и значение волнового числа данных ПВ связаны линейным дисперсионным соотношением [4]

$$k_2^2 = \frac{\omega^2}{V_{Te}^2} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2}. \quad (2)$$

Выражения для потенциала ПВ, гидродинамической скорости и возмущения плотности электронов плазмы в линейном приближении в диапазоне частот $\omega_{ce}^2 < \omega^2 \ll \omega_{pe}^2$ и в отсутствие диссипации имеют вид

$$\begin{aligned} \bar{W}^{(1)}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} [\bar{W}_1(x) \exp(i\psi_1) + \bar{W}_1^*(x) \exp(-i\psi_1)], \\ \bar{W}_1 &= (\varphi, n_e, \bar{V}_e), \quad \psi_1 = k_2 y - \omega t, \\ \varphi_1(x) &= A [\exp(-\lambda_1 x) - \exp(-\lambda_2 x)], \quad n_1(x) = \mu n_0 \exp(-\lambda_1 x), \\ V_{x1}(x) &= -i\mu V_{Te} \frac{\omega}{\omega_{pe}} \left[\frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \exp(-\lambda_1 x) - \exp(-\lambda_2 x) \right], \\ V_{y1}(x) &= -\mu V_{Te} \frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \left(\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \exp(-\lambda_1 x) - \exp(-\lambda_2 x) \right], \\ V_{z1}(x) &= -i\mu V_{Te} \frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \frac{|\omega_{ce}|}{\omega} \left(\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \exp(-\lambda_1 x) - \exp(-\lambda_2 x) \right], \\ \lambda_1 &= \frac{\omega_{pe}}{V_{Te}}, \quad \lambda_2 = \frac{\omega_{pe}}{V_{Te}} \frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2}, \quad \lambda_1 \gg \lambda_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где A - амплитуда рассматриваемой ПВ, $*$ - комплексное сопряжение.

В предположении слабой нелинейности изучаемых волн методом, аналогичным изложенному в [3], можно получить следующие выражения для вторых гармоник ПВ

$$\begin{aligned}
\bar{W}^{(2)}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} [\bar{W}_2(x) \exp(i\psi_2) + \bar{W}_2^*(x) \exp(-i\psi_2)], \\
\bar{W}_2 &= (\varphi, n_e, \bar{V}_e), \quad \psi_2 = 2(k_2 y - \omega t), \\
\varphi_2(x) &\approx -\frac{1}{6} \mu A [\exp(-\lambda_1 x) - \exp(-2\lambda_1 x)], \\
n_2(x) &\approx -\frac{1}{6} \mu^2 n_0 [\exp(-\lambda_1 x) - 4 \exp(-2\lambda_1 x)], \\
V_{x2}(x) &\approx \frac{i}{3} \mu^2 V_{Te} \frac{\omega}{\omega_{pe}} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} [\exp(-\lambda_1 x) - 2 \exp(-2\lambda_1 x)], \\
V_{y2}(x) &= \frac{8}{3} \mu^2 \frac{\omega^4}{\omega_{pe}^4} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{4\omega^2 - \omega_{ce}^2} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \right)^{\frac{1}{2}} V_{Te} [\exp(-\lambda_1 x) - \exp(-2\lambda_1 x)], \\
V_{z2}(x) &= i \frac{4}{3} \mu^2 \frac{|\omega_{ce}|}{\omega} \frac{\omega^4}{\omega_{pe}^4} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{4\omega^2 - \omega_{ce}^2} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \right)^{\frac{1}{2}} V_{Te} [\exp(-\lambda_1 x) - \exp(-2\lambda_1 x)].
\end{aligned} \tag{4}$$

В этом случае вторая гармоника согласно [8-10] не является собственной волной системы, а является вынужденным возмущением в системе, т.к. условие пространственно-временного синхронизма $k_2(2\omega) = 2k_2(\omega)$ не выполняется. В этом случае нет необходимости рассматривать резонансное взаимодействие гармоник и учитывать обратное влияние второй гармоники на первую, поскольку вторая гармоника является вынужденным возмущением, исчезающим при отключении волны накачки ($A = 0$).

Наряду с процессом генерации второй гармоники $\omega + \omega = 2\omega$ во втором приближении по амплитуде поля существует процесс генерации поверхностных потенциальных возмущений нулевой частоты $\omega - \omega = 0$

$$\begin{aligned}
\varphi^{(0)}(x) &\approx -\frac{1}{3} \mu A^* [\exp(-\lambda_1 x) - \exp(-2\lambda_1 x)], \\
n^{(0)}(x) &\approx -\frac{1}{3} |\mu|^2 n_0 [\exp(-\lambda_1 x) - 4 \exp(-2\lambda_1 x)], \\
V_x^{(0)}(x) &= V_z^{(0)}(x) = 0, \\
V_y^{(0)}(x) &= -4 |\mu|^2 \frac{\omega^4}{\omega_{pe}^4} \left(\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{\frac{1}{2}} V_{Te} \exp(-2\lambda_2 x), \\
H_x^{(0)}(x) &= H_y^{(0)}(x) = 0, \\
H_z^{(0)}(x) &= -2 \frac{e|A|^2}{m_e c} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \frac{\omega_{pe}}{V_{Te}} \frac{k_2}{\omega} [\exp(-\lambda_1 x) - 4 \exp(-2\lambda_2 x)].
\end{aligned} \tag{5}$$

Как видно из (5), процесс генерации нулевой гармоники приводит к появлению статического поверхностного тока и связанного с ним магнитного поля. Эти возмущения также являются несобственными возмущениями в системе и исчезают при отключении волны накачки ($A = 0$). Следует заметить, что данное приближение справедливо для частот, удовлетворяющих условию

$$\left(\frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega^2} \right)^{\frac{1}{2}} \gg \mu \frac{\omega}{\omega_{pe}}. \tag{6}$$

В третьем приближении по амплитуде поля можно учесть самовоздействие волн и получить зависимость дисперсионных свойств ПВ от их амплитуд. Нелинейное дисперсионное уравнение имеет вид

$$1 + \frac{V_{Te}^2}{\omega_{pe}^2} k_2^2 = \frac{V_{Te}^2}{\omega_{pe}^2} (\lambda_1^2 + \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2^2) + Q|A|^2, \tag{7}$$

где нелинейное слагаемое, связанное с самовоздействием волн имеет вид

$$Q|A|^2 \approx 2|\mu|^2 \left[5 + \frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^2 \frac{V_{Te}^2}{c^2} \right]. \quad (8)$$

Из условия $Q > 0$, следует, что учет нелинейных процессов самовоздействия приводит к увеличению фазовой скорости

$$V_{ph} = V_{Te} \frac{\omega}{\omega_{pe}} \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} - Q|A|^2 \right]^{-1}.$$

Можно показать, что каждый из каналов самовоздействия $2\omega - \omega = \omega$ (взаимодействие второй гармоники с первой с появлением отклика на основной частоте) и $0 + \omega = \omega$ (взаимодействие статических поверхностных возмущений с первой гармоникой с появлением нелинейного отклика на основной частоте) дает положительный сдвиг частоты ПВ, т.е. $Q = Q^{(2\omega)} + Q^{(0)}$ $Q^{(2\omega)} > 0, Q^{(0)} > 0$. При этом вклад в самовоздействие канала

$2\omega - \omega = \omega$ вдаль от $|\omega_{ce}|$ в $\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} \frac{c^2}{V_{Te}^2}$ раз больше, чем вклад канала $0 + \omega = \omega$, а вблизи $|\omega_{ce}|$ начинает давать вклад и канал $0 + \omega = \omega$.

Следуя работам [9,10] из нелинейного дисперсионного уравнения (7) можно получить нелинейное уравнение Шредингера, описывающее эволюцию огибающей слабонелинейной волны:

$$i \left[\frac{\partial}{\partial t} + V_g \frac{\partial}{\partial y} \right] A + \left[p_1 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + p_{12} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial y} + p_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] A = p_3 Q|A|^2 A, \quad (9)$$

$$\text{где } p_1 = -\frac{1}{2} \frac{\beta}{\omega} \frac{\omega_{ce}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2}, \quad p_{12} = \frac{V_{Te}}{\omega} \left(\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{1/2} \frac{\omega_{ce}^2}{2\omega^2 - \omega_{ce}^2}, \quad p_2 = V_{Te}^2 \frac{\omega}{2\omega^2 - \omega_{ce}^2},$$

$$p_3 = \frac{\omega_{pe}^2}{\omega} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{2\omega^2 - \omega_{ce}^2}, \quad V_g = V_{Te} \frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{2\omega^2 - \omega_{ce}^2} \left(\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} \right)^{1/2}, \quad \beta = \frac{2(\omega^2 - \omega_{ce}^2)^2 - 3\omega^2 \omega_{ce}^2}{\omega_{ce}^2 (2\omega^2 - \omega_{ce}^2)},$$

V_g - групповая скорость рассматриваемых волн.

Решение будем искать в виде стационарной волны, огибающей ПВ: $A = A_0 \exp(i\phi_0)$, где $\phi_0 \approx p_2 Q A_0^2 t$ - малая добавка к фазе волны $\psi_1 = k_2 y - \omega t$, обусловленная ее слабой нелинейностью. Вводя малые возмущения амплитуды огибающей волны в виде $\delta A = |\delta A| \exp[i(Ky - \Omega t)]$ можно получить дисперсионное соотношение для возмущений огибающей волны

$$\Omega = \frac{1}{2p_1} \left[1 + p_{12} K \pm \sqrt{K^2 (p_{12}^2 - 4p_1 p_2) + K(2p_{12} - 4p_1 V_g) + 1 - 4p_1 p_3 Q A_0^2} \right], \quad (10)$$

где K, Ω - волновое число и частота огибающей слабонелинейной ПВ.

Как видно из (10), решение для частоты возмущений огибающей ПВ при $\frac{\omega^2}{\omega_{ce}^2} > \left(\frac{\omega^2}{\omega_{ce}^2} \right)_{cr}$ является неустойчивым, если нелинейное слагаемое в дисперсионном уравнении $Q A_0^2 < (Q A_0^2)_{cr}$, где

$$\left(\frac{\omega^2}{\omega_{ce}^2} \right)_{cr} = 3.186, \quad (Q A_0^2)_{cr} = 0.5 \frac{\omega^2}{\omega_{pe}^2} \frac{2\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{ce}^2} (2 + \beta).$$

Решение (10) является неустойчивым в интервале волновых чисел (K_{01}, K_{02}) , где

$$K_{01,02} = K_0 \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{\alpha + 2\beta Q A_0^2}{\alpha(1 + \beta)^2}} \right], \quad K_0 = -\frac{\omega_{pe}}{V_{Te}} \frac{\omega^2}{\omega_{ce}^2} \frac{2\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega_{pe}^2} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{ce}^2}{\omega^2} \right)^{\frac{1}{2}} (1 + \beta), \quad \alpha = \frac{\omega^2 (2\omega^2 - \omega_{ce}^2)}{\omega_{pe}^2 \omega_{ce}^2}.$$

Максимальный инкремент нарастания возмущений достигается при $K = K_0$ и составляет

$$(\text{Im } \Omega)_{\max} = \frac{\omega}{|\beta|} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{ce}}^2}{\omega_{\text{ce}}^2} \sqrt{\beta(2 + \beta) - \frac{QA_0^2}{(QA_0^2)_{\text{cr}}}}. \quad (11)$$

Можно показать из (10), что решение для частоты возмущений огибающей ПВ при $\frac{\omega^2}{\omega_{\text{ce}}^2} < \left(\frac{\omega^2}{\omega_{\text{ce}}^2}\right)_{\text{cr}}$ также является неустойчивым в (K_{01}, K_{02}) , если $QA_0^2 > (QA_0^2)_{\text{cr}}$, и при $K = K_0$ достигает максимального инкремента (11).

ВЫВОДЫ

Таким образом, в данной работе рассмотрен нелинейный процесс самовоздействия высокочастотных потенциальных ПВ конечной амплитуды, распространяющихся на границе металла с плазмой конечного давления перпендикулярно внешнему магнитному полю, направленному поперек границы раздела. Исследована зависимость дисперсионных свойств слабонелинейной ПВ от ее амплитуды. Показано, что учет самовоздействия данных волн приводит к положительному сдвигу частоты и к увеличению ее фазовой скорости. Получено и исследовано нелинейное уравнение Шредингера, описывающее эволюцию амплитуды огибающей слабонелинейной ПВ данного типа. Найдены интервалы волновых чисел и условия, при которых возможно развитие неустойчивости относительно возмущений огибающей волны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галеев А.А., Сагдеев Р.З. Вопросы теории плазмы. М.: Атомиздат, 1973. Т. 7. С. 3.
2. Владимиров С.В., Цытович В.Н. // Физика плазмы. 1985. Т. 11. №12. С. 1458.
3. Кондратенко А.Н. Плазменные волноводы. М.: Атомиздат, 1976.
4. Азаренков Н.А., Кондратенко А.Н., Тыщеский Ю.О. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 11. С. 30-33.
5. Азаренков Н.А., Остриков К.Н. // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 11. С. 66-71.
6. Кондратенко А.Н. Поверхностные и объемные волны в ограниченной плазме. М.: Энергоатомиздат, 1985, 232 с.
7. Азаренков Н.А., Кондратенко А.Н., Остриков К.Н. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. Вып. 8. С. 11-13.
8. Азаренков Н.А., Остриков К.Н. // РЭ. 1990. Т. 35. № 2. С. 266-271.
9. Карпман В.Н. Нелинейные волны в диспергирующих средах. М.: Наука, 1973.
10. Вильгельмссон Х., Вейланд Я. Когерентное нелинейное взаимодействие волн в плазме. М.: Энергоиздат, 1981.

SELF-INTERACTION OF POTENTIAL SURFACE WAVES IN A MAGNETOACTIVE PLASMA OF A FINITE GAS PRESSURE BOUNDED BY METAL

N.A. Azarenkov, Yu.A. Akimov, A.V. Gapon

Department of Physics and Technology, Kharkov National University,
Kharkov 61108, Kurchatov av., 31
E-mail: azarenkov@pem.kharkov.ua

The influence of self-interaction of the high-frequency potential surface wave (SW) on dispersion properties of the considered SW is studied in this paper. High-frequency SW propagate across an external permanent magnetic field at the interface between a plasma of a finite gas pressure and a metal. The nonlinear dispersion relation for the SW is derived and investigated. The nonlinear Schrodinger equation for enveloping of weakly nonlinear SW is derived and tested for stability relatively perturbations of a SW enveloping.

KEY WORDS: self-interaction, nonlinear dispersion relation, harmonics

УДК 533.951

РЕЗОНАНСНЫЕ ОСТРОВА В МАГНИТНЫХ ЛОВУШКАХ СТЕЛЛАТОРНОГО ТИПА

О. А. Шишкин

Харьковский национальный университет им В.Н. Каразина, физико-технический факультет, кафедра физики плазмы.

Украина, 61108, Харьков, пр. Курчатова, 31.

Поступила в редакцию 29 сентября 2000 г.

В данной работе представлены результаты аналитического и численного исследования конфигурации силовых линий магнитного поля в магнитной ловушке HELIAS стеллараторного типа. Путем численного решения уравнений силовых линий магнитного поля проведено моделирование островных структур. Показано, что при одновременном появлении возмущений магнитного поля с различными «волновыми» числами возникают резонансные островные структуры, т.е. структуры, «волновые» числа которых являются комбинациями «волновых» чисел внесенных возмущений. Получены выражения, определяющие условия возникновения и параметры резонансных островов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: магнитные ловушки, стелларатор, токамак, резонансные структуры, острова.

Существенную роль в магнитных конфигурациях тороидальных ловушек играют островные структуры [1]. Одним из примеров может служить формирование диверторной области для удаления частиц, выходящих из объема удержания [2]. Появление островов может быть вызвано как протеканием тока в основных проводниках, так и наличием дополнительных токовых катушек, вносящих возмущения в основное магнитное поле, используемых для формирования различных видов магнитных поверхностей. В данной работе показано, что появление определенного дополнительного возмущения в магнитной системе, в которой уже существует возмущение магнитного поля и соответствующие ему острова, влечет образование двух дополнительных цепочек островов. Одна из них представляет собой результат внесенного возмущения, в то время как вторая является резонансной и возникает из-за суперпозиции двух возмущений. В ходе аналитического исследования были получены выражения, описывающие условия возникновения и параметры резонансных островов. Численное моделирование проводилось с использованием разложения магнитного поля в магнитных координатах для системы HELIAS [2,3].

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для аналитических исследований выражение, описывающее основное магнитное поле выбрано в упрощенном виде с учетом тороидальной неоднородности

$$\mathbf{B} = \frac{B_0}{1 + \frac{r}{R_0} \cos \vartheta} \left(\mathbf{e}_r \cdot 0, \mathbf{e}_\vartheta \cdot \frac{r}{R_0}, \mathbf{e}_\varphi \cdot 1 \right). \quad (1)$$

Записанное в таком виде в квазицилиндрической системе координат (рис.1) оно удовлетворяет условию

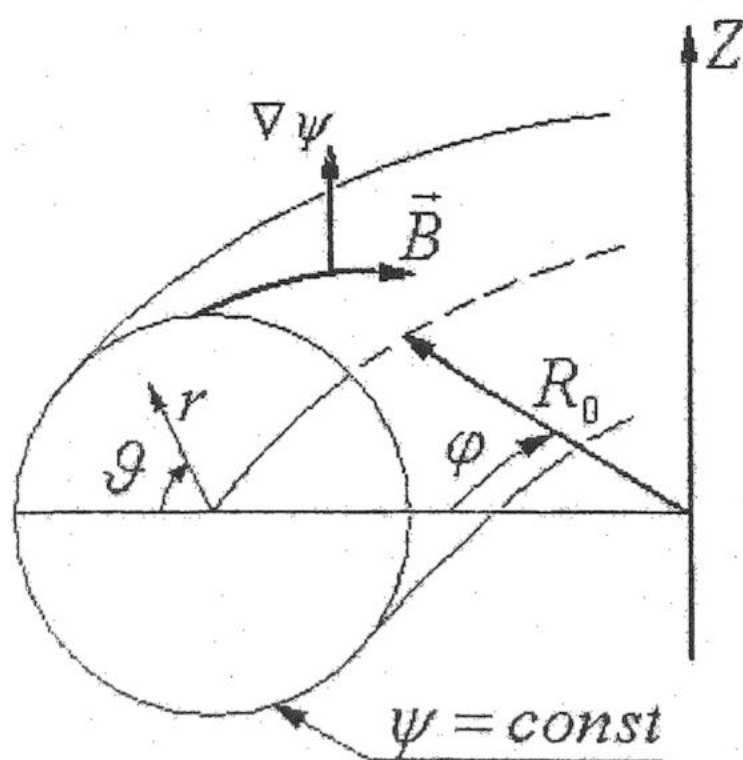


Рис.1 Квазицилиндрическая система координат.

$\text{div} \mathbf{B} = 0$ и более приемлемо для описания основного поля ловушки типа ТОКАМАК. Однако в дальнейшем рассматривается двумерная задача, и ключевыми являются зависимости магнитного поля от радиальной координаты r и угловой координаты ϑ , что позволяет применить выражение (1) для описания поля в ловушке стеллараторного типа. Квазицилиндрическая система координат определена следующим образом [1]: R_0 - большой радиус тора, отсчитываемый от прямой оси Z , и определяет положение круговой оси, от которой отсчитывается радиальная координата r . Угловая координата ϑ отсчитывается от направления, противоположного главной нормали тора; φ -угловая координата вдоль большого обхода тора, отсчитываемая от некоторого начального положения $\varphi = 0$ в таком направлении, что набор базисных векторов $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\vartheta, \mathbf{e}_\varphi$ представляет правую тройку векторов.

Силовые линии магнитного поля образуют магнитные поверхности. Тороидальный поток, т.е. поток магнитного поля, пронизывающий вертикальное сечение магнитной поверхности, запишется следующим образом

$$\psi = \int_S \mathbf{B} ds, \quad (2)$$

где S - площадь вертикального сечения магнитной поверхности. При появлении возмущения $\mathbf{B}_1$ суммарное магнитное поле запишется в виде

$$\mathbf{B}_\Sigma = \mathbf{B} + \mathbf{B}_1, \quad (3)$$

а соответствующий тороидальный поток,

$$\psi_\Sigma = \int_S \mathbf{B}_\Sigma ds, \quad (4)$$

можно переписать как сумму основного потока (2) и некой добавки, соответствующей слагаемому, описывающему возмущение магнитного поля,

$$\psi_\Sigma = \psi + \psi_1. \quad (5)$$

Из определения тороидального потока следует, что

$$\mathbf{B}_\Sigma \nabla \psi_\Sigma = 0, \quad (6)$$

или

$$(\mathbf{B} + \mathbf{B}_1) \nabla (\psi + \psi_1) = 0. \quad (7)$$

Возмущение магнитного поля выбрано в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_1 = b_m \left(\frac{r}{a_p} \right)^{m-1} B_0 \times \\ \times \left(\mathbf{e}_r \cdot \sin(m\vartheta - n\varphi), \mathbf{e}_\vartheta \cdot \cos(m\vartheta - n\varphi), -\frac{\mathbf{e}_\varphi}{nR_0} \cos((m-1)\vartheta - n\varphi) \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где b_m - амплитуда возмущения, a_p - радиус плазмы, m, n «волновые» числа возмущения. Основанием для выбора такой модели возмущения служат такие обстоятельства: Фурье-разложение магнитного поля от реальных токовых катушек содержит наборы таких слагаемых, и возмущение в таком виде удовлетворяет условию $\text{div} \mathbf{B}_1 = 0$. Подставляя выражения для основного поля и возмущения в уравнение (7) и решая его относительно ψ_1 , получаем

$$\psi_1 = \frac{b_m \left(\frac{r}{a_p} \right)^{m-1} R_0 \cos(m\vartheta - n\varphi) \frac{\partial \psi}{\partial r}}{m\iota - n}. \quad (9)$$

При определенном значении радиальной координаты силовой линии угол вращательного преобразования принимает значение, при котором знаменатель выражения (9) обращается в ноль. Как показано в работе [4], условие $m\iota - n = 0$ означает существование цепочки островов на некотором удалении от круговой оси тора. При появлении дополнительного возмущения магнитного поля, по структуре аналогичного первому, имеющего вид

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_2 = b_{m'} \left(\frac{r}{a_p} \right)^{m'-1} B_0 \times \\ \times \left(\mathbf{e}_r \cdot \sin(m'\vartheta - n'\varphi), \mathbf{e}_\vartheta \cdot \cos(m'\vartheta - n'\varphi), -\frac{\mathbf{e}_\varphi}{n'R_0} \cos((m'-1)\vartheta - n'\varphi) \right), \end{aligned} \quad (10)$$

может быть записано уравнение, аналогичное уравнению (7), а именно

$$(\mathbf{B}_\Sigma + \mathbf{B}_2) \nabla (\psi_\Sigma + \psi_2) = 0. \quad (11)$$

Решая это уравнение относительно ψ_2 , получаем

$$\psi_2 = \psi_{21}(r) \cos(m'\vartheta - n'\varphi) + \psi_{22}(r) \cos[(m'\vartheta - n'\varphi) - (m\vartheta - n\varphi)], \quad (12)$$

где

$$\psi_{21} = \frac{b_{m'} r^{m'} B_0 [m l - n] R}{(m' l - n') a_p^{m'-1}}, \quad (13)$$

$$\psi_{22} = - \frac{b_{m'} r^{m'-1} b_m m r^{m-1} B_0 R^2}{[(m' - m) l + (n - n')] a_p^{m-1} a_p^{m'-1}}. \quad (14)$$

Как видно, величина ψ_2 представлена выражением, состоящим из двух слагаемых. Первое слагаемое описывает цепочку островов, связанную с появлением дополнительного возмущения (10) с «волновыми» числами m' и n' . Механизм появления этой цепочки аналогичен механизму появления островов, связанных с возмущением B_1 и описываемых выражением (9). Однако наряду с этим в выражении (12) присутствует слагаемое, знаменатель которого обращается в ноль при условии $(m' - m)l = n' - n$, что свидетельствует о наличии еще одной, дополнительной цепочки островов. Необходимо отметить, что эта цепочка появилась не в результате воздействия отдельно взятого возмущения магнитного поля с «волновыми» числами $m'' = |m' - m|$ и $n'' = |n' - n|$, а в результате резонансного взаимодействия двух одновременно приложенных возмущений B_1 и B_2 с соответствующими «волновыми» числами (m, n) и (m', n') .

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Как уже было сказано, для численного исследования была выбрана магнитная ловушка стеллараторного типа HELIAS. В данной системе в качестве основной реализуется магнитная конфигурация с пятью островами, расположенными на определенном расстоянии от магнитной оси. Моделирование такой конфигурации проводится в потоковой системе координат [5]. Этим обусловлен вид магнитных поверхностей, представленных далее. Основное магнитное поле взято в виде ряда [6]

$$\frac{B}{B_0} = 1 + \sum_{k=0}^{\infty} b_{0,k}(r_p) \cos(Mk\zeta) + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_{l,k}(r_p) \cos(Mk\zeta - l\vartheta). \quad (15)$$

Здесь координата ζ является аналогом угловой координаты φ и отсчитывается вдоль круговой оси тора, B - магнитное поле в точке с координатами r_p, ζ, ϑ ; B_0 - напряженность магнитного поля на магнитной оси;

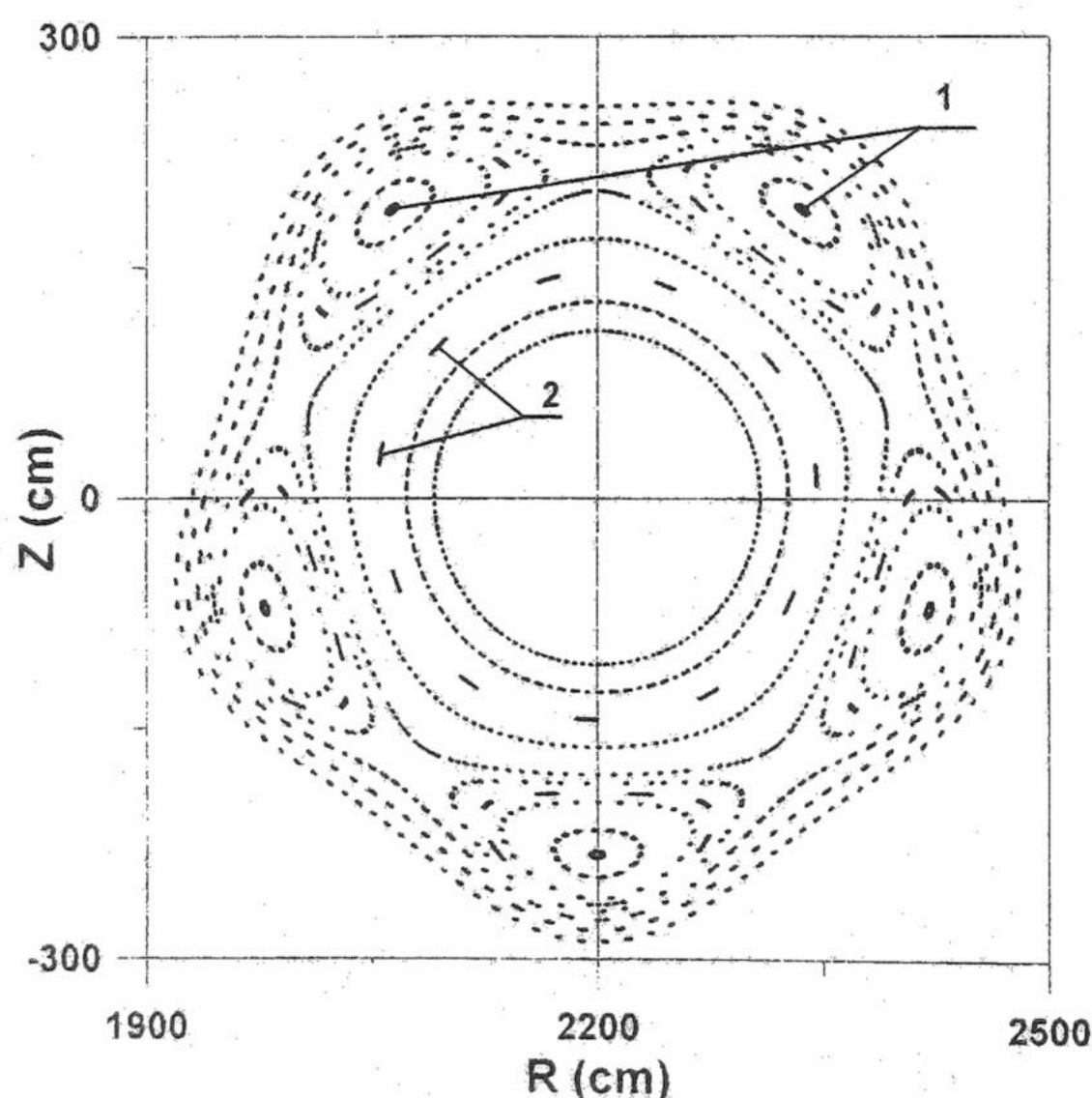


Рис. 2 Основная конфигурация магнитных поверхностей ловушки стеллараторного типа HELIAS, представленная в магнитных координатах. (1-центры магнитных островов, 2-следы рациональной магнитной поверхности на радиусе $r_p \approx 0.6$)

$r_p = \frac{r}{a_p}$ - относительная радиальная координата;

M - число периодов магнитного поля вдоль большого обхода тора.

При наложении на основное поле (15) возмущения в виде [7]

$$\delta B_l = \nabla \times \alpha_l B, \quad (16)$$

где $\alpha_l = \alpha \cdot r_p^m \sin(n\zeta - m\vartheta - \omega t + \delta)$ с

«волновыми» числами $m = 5$, $n = 5$, образуются соответствующие магнитные поверхности с пятью островами, центры которых расположены на радиусе $r_p \approx 1.2$ (рис. 2). На радиусе $r_p \approx 0.6$ образуется рациональная магнитная поверхность, т.е. поверхность для которой выполняется условие,

$l = \frac{n}{m}$ где n и m целые числа, и которая выглядит в

виде сгустков следов силовой линии. Такая поверхность при наложении определенного возмущения может трансформироваться в цепочку из одиннадцати островов. При наличии возмущения в виде (16), но с «волновыми» числами $m' = 16$, $n' = 15$ наблюдается появление

шестнадцати островов на радиусе $r_p = 0.81$ и разрушение основных пяти островов (рис.3). Значения «волновых» чисел подобраны таким образом чтобы дополнительное возмущение магнитного поля проявилось внутри плазмы, т.е. $r_p < 1$.

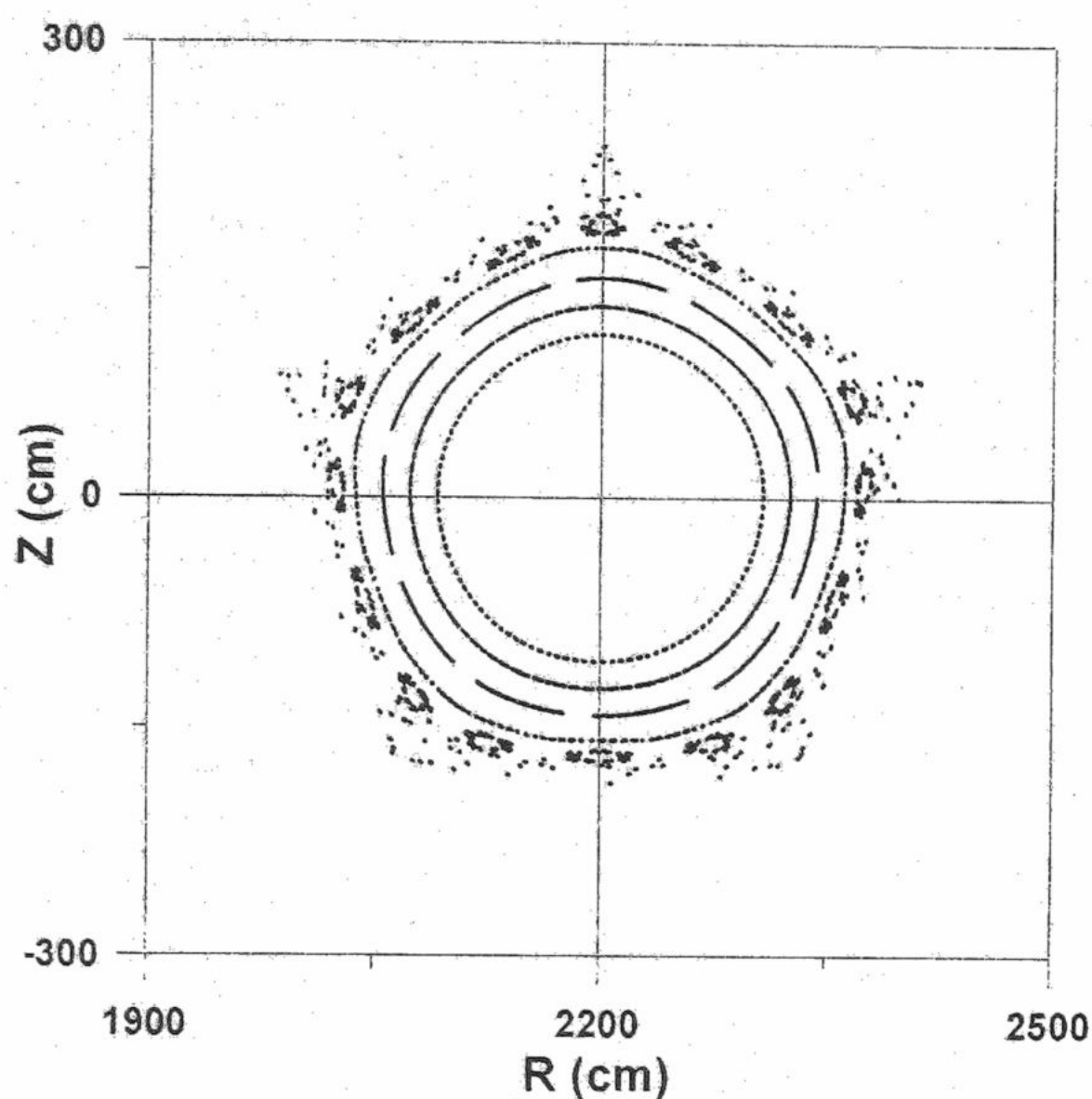


Рис. 3 Вертикальное сечение магнитных поверхностей при наличии дополнительного возмущения магнитного поля ($\alpha = 10^{-6}, m = 16, n = 15$)

Как было сказано выше, при наложении двух возмущений одновременно необходимо ожидать появления резонансной цепочки островов с «волновыми» числами $m'' = |m' - m|$ и $n'' = |n' - n|$. В данном случае ожидается появление островов, соответствующих возмущению ($m'' = 11, n'' = 10$). При дальнейшем увеличении амплитуды возмущения ($m' = 16, n' = 15$) цепочка, состоящая из шестнадцати островов разрушается, а рациональная поверхность превращается в одиннадцать островов (рис.4).

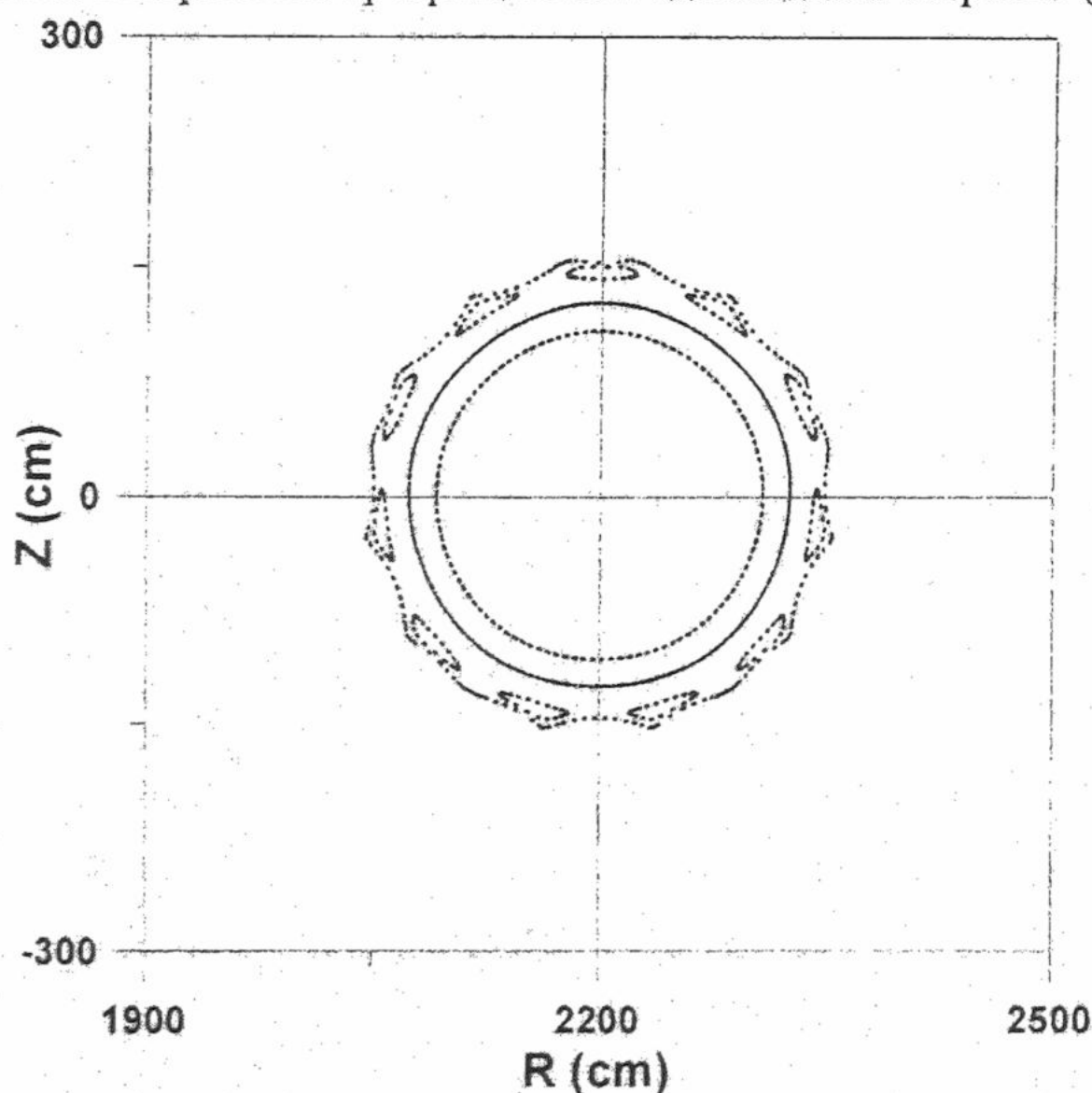


Рис. 4 Вертикальное сечение магнитных поверхностей при наличии дополнительного возмущения магнитного поля с увеличенной амплитудой ($\alpha = 3 \cdot 10^{-5}, m = 16, n = 15$)

ВЫВОДЫ

Суперпозиция двух аналогичных по структуре возмущений, различающихся только наборами «волновых» чисел (m, n) , (m', n') и амплитудами, приводит к появлению дополнительной цепочки островов. Такая цепочка островов может быть вызвана появлением отдельного статического возмущения с «волновыми» числами $m'' = |m - m'|$ и $n'' = |n - n'|$. При создании наряду с основной магнитной конфигурацией статических возмущений магнитного поля в магнитной ловушке HELIAS необходимо учитывать эффект появления комбинированных островных структур. При определенных амплитудах возмущений может происходить разрушение внешних магнитных поверхностей и появление островов, лежащих на малых радиусах, что существенно уменьшает объем удержания плазмы.

Автор выражает благодарность доктору физ.-мат. наук Шишкину А.А. за предложенную тему для исследования и обсуждение результатов работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е.Д. Волков, В.А. Супруненко, А.А. Шишкин, СТЕЛЛАТОР. – Киев, Наукова Думка 1983, 312с.
2. C.D. Beidler, G. Grieger, E. Harmeyer, J. Kisslinger, N.Karulin, W.Maurer, J.Nuhrenberg, F.Rau, J. Sapper, H.Wobig, *Helias Reactor Studies* // IPP-Report, IPP 2/330, October 1995.
3. C.D. Beidler, E. Harmeyer, J. Kisslinger, I. Ott, F. Rau, H. Wobig, *Studies on a Stellarator Reactor of the Helias Type: The Power Balance* // IPP-Report, IPP 2/318, June 1993.
4. Л.С. Соловьев, В.Д. Шафранов, Замкнутые магнитные конфигурации для удержания плазмы. – Вопросы теории плазмы, 1967, вып. 5, с.3-208.
5. W.D. D'haeseleer, W.N.G. Hitchon, J.D. Callen, J.L. Shohet, *Flux Coordinates and Magnetic Field Structure* // Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1991, 241 pages.
6. C.D. Beidler, *Neoclassical Transport Properties of HSR* // Proceedings of the 6th Workshop on WENDELSTEIN 7-X and Helias Reactors, IPP 2/331, January (1996) 194.
7. R.B. White and M.S. Chance, *Hamiltonian Guiding Center Drift Orbit Calculation for Plasmas of Arbitrary Cross Section* // Phys. Fluids 27 (10), October (1984) 2455.

RESONANT ISLANDS IN THE MAGNETIC TRAPS OF STELLARATOR TYPE

O.A. Shishkin

V.N. Karazin Kharkov National University, Department of Physics and Technology, Plasma Physics Chair.
Ukraine, 61108, Kharkov, pr. Kurchatova, 31.

In the present paper results of the analytical and numerical studies of the magnetic field lines in stellarator HELIAS are presented. Models of the island structures were obtained by calculation of the magnetic field lines equations. It was shown that the magnetic field perturbations with different "wave" numbers cause resonant magnetic islands structures. The "wave" numbers of such resonant structures are the combination of the "wave" numbers corresponding to the magnetic field perturbations. Analytical expressions that determine the conditions of the creation and parameters of the resonant structures are obtained.

KEY WORDS: magnetic traps, stellarator, tokamak, resonant structures, islands.

V/JK 536.48; 537.6

TEMPORAL AND SPATIAL CORRELATIONS OF FLUCTUATIONS IN GAS DYNAMICS OF QUASI-PARTICLES

V. F. Aleksin and V. D. Khodusov

Kharkiv National University named after V.N.Karazin

4, sq. Svobody, Kharkiv 61077, Ukraine

e-mail: khodusov@pem.kharkov.ua

Received 26 October, 2000

Spatial and temporal fluctuations of the temperature field and the field of drift velocities in a weakly non-ideal gas of quasi-particles are considered. Temporal and spatial dimensions of correlations of the above fields are found.

KEY WORDS: spectral density, correlation of fluctuations, quasi-particles, secondary waves.

Spectral densities of correlations of fluctuations of the main quantities that specify the behaviour of weakly non-ideal gas of quasi-particles are obtained in [1]. In this case, the main attention focussed on calculation of the most significant spectral densities of correlations of the temperature field fluctuations and the drift velocities field in gas dynamics of quasi-particles. Knowing these spectral densities, one can calculate temporal and spatial correlations of fluctuations of the above fields and determine temporal and spatial dimensions of these correlations. We consider temporal and spatial correlations of the relative temperature field $\Theta = (T - T_0)/T_0$ and the drift velocity $\vec{u}$. Here T_0 is the thermodynamically equilibrium temperature.

TEMPORAL CORRELATIONS

We describe the temporal correlations by the following expression

$$\langle AB \rangle_{\vec{k},t} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle AB \rangle_{\vec{k},\omega} e^{-i\omega t} d\omega, \quad (1)$$

where $\langle AB \rangle_{\vec{k},\omega}$ is the spectral density of correlators of fluctuations of the quantities A and B. In calculation of the integral we shall analytically extend $\langle AB \rangle_{\vec{k},\omega}$ in a lower semi-plane of complex ω and use the residue Cauchy theorem. As a result we obtain

$$\langle AB \rangle_{\vec{k},t} = -2\pi i \sum \text{Res} \left(\langle AB \rangle_{\vec{k},\omega} e^{-i\omega t} \right), \quad (\text{Im } \omega < 0), \quad (2)$$

where the summation is made over the residues of the function $\langle AB \rangle_{\vec{k},\omega} e^{-i\omega t}$ relative to the poles of located in the lower semi-plane ω . A quantum-mechanic factor $C(\omega) = \hbar \omega \text{cth}(\hbar \omega / 2T_0) / (2\pi)^4$, that is, $\langle AB \rangle_{\vec{k},\omega} = C(\omega) f(\vec{k}, \omega)$ is characteristic of these functions. The function $C(\omega)$ has the poles on the imaginary axis ω in the points $\omega = -iv_n$, where $v_n = 2\pi n T / \hbar$ ($n = 1, 2, \dots$). The contributions of these poles into the integral will be equal to $\frac{2T}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} f(\vec{k}, -iv_n) e^{-v_n t}$. This contribution will be exponentially small at $t \gg \hbar/T$. It may become essential only at $t \leq \hbar/T$. However, such values of t are contradictory to the Heisenberg-Born's energy-time quantum-mechanic principle of indeterminacy according to which $Tt \geq \hbar$. So, we shall consider further on that $t \gg \hbar/T$ and the contribution of poles $C(\omega)$ can be neglected.

The contribution of other poles depend on the form of the function $f(\vec{k}, \omega)$. It is more simple to determine the main peculiarities of temporal correlations of fluctuations using the example of the isotropic medium for which the spectral densities have been calculated in [1] and have the form

$$\langle \theta^2 \rangle_{\vec{k},\omega} = -\frac{c(\omega)}{CT} \text{Im} \left\{ \frac{\omega + i(v + v')}{\Delta} \right\}; \quad \langle u_{II}^2 \rangle_{\vec{k},\omega} = -\frac{c(\omega)}{\tilde{\rho}} \text{Im} \left\{ \frac{\omega + i(v - v')}{\Delta} \right\};$$

$$\begin{aligned} \langle u_{i\perp} u_{j\perp} \rangle_{\vec{k}, \omega} &= -\frac{c(\omega)}{\tilde{\rho}} (\delta_{ij} - n_i n_j) \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\omega + i\nu_r + i\Omega^2 \tau_{\tilde{\eta}}} \right\}; \\ \langle u_{II} \theta \rangle_{\vec{k}, \omega} &= -\frac{Skc(\omega)}{C\tilde{\rho}} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\Delta} \right\}; \quad \langle u_{i\perp} u_{II} \rangle_{\vec{k}, \omega} = \langle u_{i\perp} \theta \rangle_{\vec{k}, \omega}, \end{aligned} \quad (3)$$

where u_{II} and $\bar{u}_{\perp}$ are the projections of the drift velocity onto the direction of a wave vector $\vec{k}$, $\Delta = (\omega + i\nu)^2 - (\Omega^2 - \nu'^2)$; $\nu = \frac{1}{2}(\nu_r + \Omega^2(\tilde{\tau} + \tilde{\tau}_\kappa))$ is the coefficient of secondary wave damping (SW) [2], $\nu' = \frac{1}{2}(\nu_r + \Omega^2(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}_\kappa))$; $\tau_{\tilde{\kappa}} = \frac{\tilde{\kappa}}{CW_{II}^2}$; $\tau_{\tilde{\eta}} = \frac{\tilde{\eta}}{\tilde{\rho}W_{II}^2}$; $\tilde{\tau} = \left(\xi^2 + \frac{4}{3}\tilde{\eta} \right) / \tilde{\rho}W_{II}^2$ are the diffusion times on account of normal N-processes; $\nu_r^{-1} = r/\tilde{\rho}$ is the relaxation time of the drift velocity on account of U-processes, $\Omega = kW_{II}$ is the SW frequency, $W_{II} = \sqrt{TS^2/\tilde{\rho}C}$ is the SW velocity, $\tilde{\rho}$ is the quasi-particles density, S and C are the densities of entropy and thermal capacity of gas of quasi particles, $\tilde{\eta}$, $\tilde{\xi}$ are the first and second viscosity coefficients, $\tilde{\kappa}$ is the hydrodynamic conductivity coefficient, r is the coefficient of external friction in gas of quasi particles.

For spectral densities $\langle \Theta^2 \rangle_{\vec{k}, \omega}$, $\langle u_{II}^2 \rangle_{\vec{k}, \omega}$, $\langle \Theta u_{II} \rangle_{\vec{k}, \omega}$ the poles are located in the points $\omega_{\pm} = -i\nu \pm \sqrt{\Omega^2 - \nu'^2}$, where $\Delta(\omega_{\pm}) = 0$, while for $\langle u_{i\perp} u_{j\perp} \rangle_{\vec{k}, \omega}$ – on the imaginary axis in the points $i(\nu_r + \Omega^2 \tau_{\tilde{\eta}})$. Finding residues in the corresponding poles, we obtain temporal correlators of the temperature field as

$$\begin{aligned} \langle \Theta^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{\pi e^{-\nu t}}{CT \cos \varphi} \operatorname{Re} \left(C(\omega_+) e^{-i\tilde{\Omega}t + i} \right), \quad (\nu' \leq \Omega); \\ \langle \Theta^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{\pi e^{-\nu t}}{2CT \operatorname{sh} \beta} \left(C(\omega_+) e^{|\tilde{\Omega}|t + \beta} - C(\omega_-) e^{-|\tilde{\Omega}|t - \beta} \right), \quad (\nu' \geq \Omega), \end{aligned} \quad (4)$$

where $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega^2 - \nu'^2}$. Note that in actual practice at the values of parameters in the field of application of gas dynamics of quasi-particles being real, the function $C(\omega)$ can be replaced by its classical limit $C(\omega) = T/(2\pi)^4$. Then

$$\begin{aligned} \langle \Theta^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{e^{-\nu t}}{2(2\pi)^3 C \cos \varphi} \cos(\tilde{\Omega}t - \varphi), \quad (\nu' \leq \Omega); \\ \langle \Theta^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{e^{-\nu t}}{2(2\pi)^3 C \operatorname{sh} \beta} \operatorname{sh}(|\tilde{\Omega}|t + \beta), \quad (\nu' \geq \Omega), \end{aligned} \quad (5)$$

where $\varphi = \arcsin(\nu'/\Omega)$, $\beta = \ln(\nu'/\Omega + \tilde{\Omega}/\Omega)$. For other correlators we shall give the final results

$$\begin{aligned} \langle u_{II}^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{Te^{-\nu t}}{2(2\pi)^3 \tilde{\rho} \cos \varphi} \cos(\tilde{\Omega}t - \varphi), \quad (\nu' \leq \Omega); \\ \langle u_{II}^2 \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{Te^{-\nu t}}{2(2\pi)^3 \tilde{\rho} \operatorname{sh} \beta} \operatorname{sh}(\beta - |\tilde{\Omega}|t), \quad (\nu' \geq \Omega); \end{aligned} \quad (6)$$

$$\langle u_{i\perp} u_{j\perp} \rangle_{\vec{k}, t} = \frac{T}{2(2\pi)^3 \tilde{\rho}} (\delta_{ij} - n_i n_j) e^{-(\nu_r + \tilde{\Omega} \tau_{\tilde{\eta}})t}. \quad (7)$$

Temporal correlation of the energy density along the wave vector $\vec{k}$ is equal to

$$\begin{aligned}\langle \delta U_{II} \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{T e^{-\nu t}}{2(2\pi)^3} \cos \tilde{\Omega} t, \quad (\nu' \leq \Omega); \\ \langle \delta U_{II} \rangle_{\vec{k}, t} &= \frac{T e^{-\nu t}}{2(2\pi)^3} \operatorname{ch} |\tilde{\Omega}| t, \quad (\nu' \geq \Omega).\end{aligned}\quad (8)$$

It is seen from the obtained formulae that temporal dimensions of fluctuations are determined by the quantity being the reciprocal of the damping coefficient SW $t_k = \nu^{-1}$ and will be maximum in the field of existence of SW.

SPATIAL CORRELATIONS

Let us consider spatial correlators determined by the following integral

$$\langle AB \rangle_{\vec{x}, \omega} = \int \langle AB \rangle_{\vec{k}, \omega} e^{-i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}. \quad (9)$$

These correlators is the even function ω therefore, for the sake of definiteness, let $\omega \geq 0$. Note, that in the field of applicability of equations of gas dynamics of quasi-particles [2] ($\Omega \ll \min(\tilde{\tau}^{-1}, \tau_{\tilde{\kappa}}^{-1})$) a summand $\Omega^4 \tilde{\tau} \tau_{\tilde{\kappa}}$ in Δ can be neglected. So, Δ can be written as

$$\Delta = -W_{II}^2 d(k^2 + k_1^2), \quad (10)$$

where $d = 1 + \nu_r \tau_{\tilde{\kappa}} - i\omega(\tilde{\tau} + \tau_{\tilde{\kappa}})$; $k_1^2 = (\omega^2 + i\nu_r \omega)/W_{II}^2 d$.

Let us next consider the most important for the experiments spatial correlation of the temperature field

$$\langle \Theta^2 \rangle_{\vec{x}, \omega} = \frac{C(\omega)}{CTW_{II}^2} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{d} \left[(\omega + i\nu_r) \int \frac{e^{-i\vec{k}\vec{x}}}{k^2 + k_1^2} d\vec{k} + iW_{II}^2 \tilde{\tau} \int \frac{e^{-i\vec{k}\vec{x}} k^2}{k^2 + k_1^2} d\vec{k} \right] \right\}. \quad (11)$$

The integrals over $\vec{k}$ can be calculated either by means of residues, or as it was made in [3] using the formulae

$$\int \frac{e^{-i\vec{k}\vec{x}}}{k^2 + k_1^2} d\vec{k} = \frac{2\pi^2}{x} e^{-\sqrt{k_1^2} x}; \quad \int \frac{e^{-i\vec{k}\vec{x}} k^2}{k^2 + k_1^2} d\vec{k} = 2\pi^2 \left(-\frac{k_1^2 e^{-\sqrt{k_1^2} x}}{x} + 4\pi\delta(\vec{x}) \right),$$

where $\sqrt{k_1^2}$ is the main value of the root ($\operatorname{Re} \sqrt{k_1^2} \geq 0$). This results in

$$\langle \Theta^2 \rangle_{\vec{x}, \omega} = \frac{2\pi^2}{W_{II}^2} \frac{C(\omega)}{CT} \left\{ \operatorname{Im} \left(\frac{A e^{-\sqrt{k_1^2} x}}{x} \right) + \frac{4\pi W_{II}^2 \tilde{\tau} (1 + \nu_r \tau_{\tilde{\kappa}})}{|d|^2} \delta(\vec{x}) \right\}. \quad (12)$$

Here $A = \frac{\omega + i\nu_r - ik_1^2 \tilde{\tau} W_{II}^2}{d}$. We shall present k_1^2 as $k_1^2 = (a + ib)/W_{II}^2$, where $a = -\omega^2(1 - \nu_r \tilde{\tau})/|d|^2$;

$b = -\omega(\nu_r(1 + \tau_{\tilde{\kappa}} \nu_r) + \omega^2(\tilde{\tau} + \tau_{\tilde{\kappa}}))/|d|^2$; $W_{II}^2 |k_1|^2 = \sqrt{a^2 + b^2} = \omega \sqrt{\omega^2 + \nu_r^2}/d$. In the above designations the main value of the root $\sqrt{k_1^2}$ equals

$$\sqrt{k_1^2} = q_1 + iq_2; \quad q_{1,2} = \left(\frac{1}{2W_{II}^2} (\sqrt{a^2 + b^2} \pm a) \right)^{1/2}. \quad (13)$$

We present the quantity A as $A = |A| e^{i\psi}$, where

$$|A| = \sqrt{(\omega^2 + \nu_r^2) \left((1 + \nu_r \tau_{\tilde{\kappa}})^2 + \omega^4 (\tau_{\tilde{\kappa}} + \tilde{\tau})^2 \right)} / |d|^3; \quad \psi = \operatorname{arctg} \frac{\nu_r}{\omega} + \operatorname{arctg} \frac{1 + \nu_r \tau_{\tilde{\kappa}}}{\omega^2 (\tilde{\tau} + \tau_{\tilde{\kappa}}) \tau_{\tilde{\kappa}}}. \quad (14)$$

Substituting these expressions in (12) we obtain

$$\langle \theta^2 \rangle_{\vec{x}, \omega} = \frac{2\pi^2}{W_H^2} \frac{C(\omega)}{CT} \left\{ \frac{|A|}{x} e^{-q_1 x} \sin(q_2 x + \psi) + \frac{4\pi W_H^2 \tilde{\tau}(1 + v_r \tau_{\tilde{\kappa}})}{|d|^2} \delta(\vec{x}) \right\}. \quad (15)$$

In the field where the inequalities $v_r(\tilde{\tau} + \tau_{\tilde{\kappa}}) \ll 1$ and $\omega(\tilde{\tau} + \tau_{\tilde{\kappa}}) \ll 1$ take place we obtain $|d| = 1$,

$\psi = \arctg v_r / \omega$, $|A| = \sqrt{\omega^2 + v_r^2}$, $q_{1,2} = \omega \left(\sqrt{1 + v_r^2 / \omega^2} \mp 1 \right)^{1/2} / \sqrt{2} W_H$. In this case we arrive at

$$\langle \theta^2 \rangle_{\vec{x}, \omega} = \frac{2\pi^2}{W_H^2} \frac{C(\omega)}{CT} \left\{ \frac{\sqrt{\omega^2 + v_r^2}}{x} e^{-q_1 x} \sin(q_2 x + \psi) + 4\pi W_H^2 \tilde{\tau} \delta(\vec{x}) \right\}. \quad (16)$$

From the obtained formulae we can see that the spatial dimension of correlations is determined by the following expression $l_k = q_1^{-1}$. Other spatial correlators of fluctuations can be calculated in much the same way.

The work is supported by UNTC (project № 1499).

REFERENCES

1. Aleksin V.F., Khodusov V.D., Visnyk KhNU, physical series "Nuclei, particles, fields", 2000, № 490, issue 3/11/, pp. 45-48.
2. Akhiezer A.I., Aleksin V.F., Khodusov V.D. FNT, 1994, 20, pp.1199-1238; FNT, 1995, 21, pp. 3-23.
3. Landau L.D., Lifshits E.M.. Electrodynamics of continuous media [in Russian]. – M.: Gostekhizdat, 1957, 560 p.

ВРЕМЕННЫЕ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ФЛУКТУАЦИЙ В ГАЗОДИНАМИКЕ КВАЗИЧАСТИЦ

В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина.

Украина, 61077, г. Харьков, пл. Свободы, 4.

e-mail: khodusov@pem.kharkov.ua

Рассмотрены пространственные и временные корреляции флуктуации температурного поля и поля дрейфовых скоростей в слабонеидеальном газе квазичастиц. Найдены временные и пространственные размеры корреляций этих полей.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: спектральная плотность, корреляции флуктуаций, квазичастицы, вторичные волны.