

СОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ

[681.142+53](048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ
И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ АКАДЕМИИ НАУК СССР**

(28—29 сентября 1983 г.)

28 и 29 сентября 1983 г. в Физическом институте им. П. Н. Лебедева АН СССР состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

28 сентября

1. В. А. Мельников, И. Л. Талов, Ю. Н. Дьяков. Микро- и миниЭВМ; персональные ЭВМ.
2. Б. Н. Наумов, И. Я. Ландау. Система вычислительных машин СМ.
3. Б. И. Ермолаев. Единые системы ЭВМ «Ряд».
4. А. А. Новиков. Вычислительная система «Эльбрус».

29 сентября

5. А. А. Мигдал. Решеточные модели в квантовой хромодинамике и результаты расчетов на ЭВМ.
6. Е. Г. Максимов. Использование ЭВМ в физике конденсированного состояния.
7. Р. З. Сагдеев. Численное разыгрывание плазменных ситуаций. Краткое содержание трех докладов публикуется ниже.

681.142(048)

Б. Н. Наумов, И. Я. Ландау. Система вычислительных машин СМ. Разработка СМ ЭВМ (Система малых ЭВМ) была начата в 1974 г. как совместная программа, выполняемая НРБ, ВНР, ГДР, Республикой Куба, ПНР, СРР, СССР и ЧССР. При этом в качестве основных областей применения СМ ЭВМ были определены автоматизация технологических процессов, автоматизация научных исследований и испытательных установок и автоматизация проектно-конструкторских работ.

Для объединения усилий в разработке и организации производства средств СМ ЭВМ необходимо было прежде всего определить общие принципы построения СМ ЭВМ и архитектуру системы. Для этого на первом этапе работ была разработана система стандартов СМ ЭВМ, определяющих архитектуру, способы подключения устройств ввода-вывода (интерфейсы) и конструкцию.

В рамках первой очереди СМ ЭВМ (1974—1979 гг.) были разработаны и освоены в производстве четыре модели процессоров, ферритовые и полупроводниковые запоминающие устройства, внешние запоминающие устройства на магнитных лентах и дисках, ряд устройств ввода-вывода. Конструкция СМ ЭВМ предусматривает изготовление отдельных устройств в виде автономных комплектных блоков (АКБ) стандартных размеров, содержащих собственные источники питания и вентиляторы. В сочетании со стандартами на интерфейсы это обеспечило возможность создания различных по составу оборудования комплексов СМ ЭВМ без каких-либо специальных наладочных работ.

Сейчас наиболее распространенным процессором СМ ЭВМ является СМ-4. Он имеет быстродействие около 900 тыс. операций/с (типа регистр — регистр) и может работать с оперативной памятью до 256 кбайт. Комплексы на базе СМ-4 включают запоминающие устройства на магнитных дисках (емкостью 5 и 29 Мбайт) и лентах (емкостью 10 Мбайт), печатающие устройства, алфавитно-цифровые и графические дисплеи, устройства телеобработки и ряд других устройств.

Наряду с выпуском типовых комплексов СМ ЭВМ (выпускается 14 модификаций таких комплексов) для наиболее массовых областей применения СМ ЭВМ выпускаются проблемно-ориентированные комплексы (ПОК). Проблемная ориентация ПОК определяется составом устройств и программных средств, отвечающих требованиям данного класса применений. Сейчас выпускаются ПОК для задач управления научным экспериментом (измерительно-вычислительные комплексы — ИВК; их выпускается 6 типов) и задач автоматизации проектирования (автоматизированные рабочие места — АРМ; их выпускается 3 типа). ИВК кроме стандартных устройств СМ ЭВМ включает аппаратуру КАМАК (модификации ИВК различаются по числу каналов ввода-вывода аналоговых и дискретных сигналов, точности и скорости аналого-цифровых преобразователей). АРМ включают устройства обработки графических данных (графические дисплеи, графопостроители, устройства ввода данных с чертежа).

Для тех пользователей, которых не устраивает конфигурация типовых комплексов и ПОК, выпускаются комплексы в составе, определяемом заказчиком (УВКС); сейчас в виде УВКС выпускается около 60% машин СМ ЭВМ.

В 1979 г. была разработана концепция создания второй очереди СМ ЭВМ, рассчитанная на период 1980—1984 гг. Во второй очереди, наряду с развитием линии СМ-4, появился новый класс машин — 8-разрядная микроЭВМ СМ-1800. Она предназначена для встраивания в приборы, создания терминальных комплексов сбора и первичной обработки данных, автоматизации экономических расчетов в небольших учреждениях, обработки текстов и т. д. СМ 1800 не требует специального обслуживания и очень проста в эксплуатации.

Линия машин, программно совместимых с СМ-4, представлена во второй очереди двумя моделями: микроЭВМ СМ-1800 и миниЭВМ СМ-1420. Они представляют собой развитие СМ-4 «вниз» (СМ 1300 — быстродействие около 500 тыс. операций/с, объем памяти — 56 Кбайт) и «вверх» (СМ-1420 — быстродействие около 1 млн. операций/с, объем памяти до 2 Мбайт). При этом, благодаря широкому использованию микропроцессорной элементной базы, габариты центральной части комплексов на СМ-1420 примерно в три раза меньше, чем у СМ-4.

Во второй очереди разработаны также спецпроцессоры, позволяющие на 2—3 порядка повысить производительность вычислительного комплекса на определенных классах задач (Фурье-процессор, матричный процессор) или реализующие языки программирования (интерпретатор языка АНАЛИТИК, языковой «экономический» процессор).

Значительное внимание во второй очереди уделено разработке адаптеров и мультиплексоров для создания сетей ЭВМ и дистанционной связи машин СМ ЭВМ с машинами других типов. Начался также выпуск новых внешних запоминающих устройств, устройств ввода-вывода и других.

Опыт использования машин первой и второй очередей СМ ЭВМ показал, что реальная сфера их применения значительно шире, чем было определено в начальный период разработки. Сейчас машины СМ ЭВМ применяются в экономике, образовании, торговле, медицине, на транспорте, в системах связи, т. е. практически во всех сферах народного хозяйства. В связи с этим оказалось необходимым резко повысить массовость выпуска СМ ЭВМ. Для этого необходимо существенное повышение надежности комплексов СМ ЭВМ, упрощение их обслуживания, создание для типовых применений готовых систем со всем необходимым программным обеспечением. Решение этих задач предусматривается в третьей очереди СМ ЭВМ (1984—1987 гг.). Одним из основных требований к машинам третьей очереди является обеспечение преемственности со второй очередью по программному обеспечению и интерфейсам. В третьей очереди СМ ЭВМ предусматривается, наряду с дальнейшим развитием существующих линий СМ-4 и СМ 1800, разработка 32-х разрядных мега-миниЭВМ и дальнейшая интеграция средств СМ ЭВМ и ЕС ЭВМ, а также разработка нового класса микроЭВМ — персональных ЭВМ (ПЭВМ). ПЭВМ — машина личного пользования; несмотря на низкую стоимость и настольное исполнение, ПЭВМ по своим возможностям не уступает нынешнему комплексу на СМ-4.

Пользователь современных ЭВМ работает в среде операционной системы (ОС) и для него могут быть более существенны особенности ОС, чем конкретные характеристики оборудования. В связи с многообразием применений СМ ЭВМ для каждой архитектурной линии разработаны и развиваются несколько ОС (ОС РВ, РАФОС, ДОС КП и ДИАМС для линии СМ-4; ОС 1800, МОС РВ — для линии СМ 1800).

ОС СМ ЭВМ дают широкий набор языков программирования (ФОРТРАН, БЭЙСИК, КОБОЛ, ПАСКАЛЬ), включают средства подготовки и редактирования текстовой информации, программирования задач машинной графики и обеспечивают возможность создания сетей ЭВМ.

Кроме операционных систем с системами программирования в составе программного обеспечения СМ ЭВМ имеется ряд пакетов прикладных программ (системы управления базами данных, пакеты численного анализа, обработки результатов эксперимента и др.).

В третьей очереди СМ ЭВМ, наряду с развитием функциональных возможностей существующих программных средств, планируются работы по созданию мобильного (переносимого на машины разных типов) программного обеспечения. В частности, будет разработана единая для всех типов машин СМ ЭВМ операционная система ИНМОС.

1681.142 + 539.12.01 (048)

А. А. Мигдал. Решеточные модели в квантовой хромодинамике и результаты расчетов на ЭВМ. До недавнего времени теоретическая физика элементарных частиц ограничивалась очень скромным оборудованием. В то время как экспериментальная физика требовала колоссальных ускорителей, а прикладная физика — сверхмощных компьютеров, теоретическая физика обходилась бумагой и авторучкой. Это было связано с тем, что царящая в то время теория — квантовая электродинамика (КЭД) поддавалась замечательно простому и эффективному теоретическому методу — теории возмущений. Это же относится к теории электрослабых взаимодействий, объединившей недавно теории слабых и электромагнитных сил.

Между тем, наиболее мощные известные силы природы — сильные взаимодействия — долгое время вообще оставались загадкой. Когда же была сформулирована квантовая хромодинамика (КХД), призванная описывать сильные взаимодействия, то оказалось, что теория возмущений имеет в ней весьма ограниченную область применимости. А именно, теория возмущений применима для описания виртуальных процессов на сверхмалых расстояниях. Например, при столкновении быстрых электрона и позитрона может образоваться виртуальный фотон, который родит пару кварк — антикварк. До тех пор, пока эта пара не разлетится на расстояние порядка $r_c = 10^{-13}$ см, применима теория возмущений, т. е. можно описывать взаимодействия кварков как результат обмена глюонами. Это дает кулоновские силы, как в КЭД, но с логарифмически растущей постоянной вместо e^2 :

$$g_{\text{eff}}^2(r) = \frac{C}{\ln(r_c/r)}, \quad (1)$$

где C — универсальная численная постоянная. При $r \gg r_c$ теория возмущений неприменима. Мы ожидаем, что в этой области силы продолжают расти и выходят при $r \rightarrow \infty$ на постоянное значение, так что потенциал $V(r)$ растет линейно. Это удивительное явление происходит, как мы думаем, за счет больших и сильнофлуктуирующих полей глюонов. Такие поля весьма далеки от набора квантов и требуют новых методов описания.

Эта проблема возникла 10 лет назад. За эти 10 лет сделано не так уж много, но по крайней мере мы теперь находимся на твердой почве. Хотя не было открыто никакого метода, сравнимого по простоте и эффективности с фейнмановской теорией возмущений, зато существуют численные методы, обладающие точностью 10—20%. Точность может быть увеличена за счет применения специализированных ЭВМ, а также за счет комбинирования численных методов с аналитическими.

Перед тем как описывать эти методы, уместно сказать несколько слов о том, почему мы считаем проблему важной и почему нас не устраивает точность 20%. Дело в том, что по современным представлениям все силы природы основаны на неабелевых калибровочных полях, как и КХД. В этих полях, на масштабах больше некоторого, развиваются крупномасштабные флуктуации. Мы ожидаем встретить на сверхмалых расстояниях внутри кварков иерархию таких масштабов. Поэтому методы решения КХД одновременно будут применимы и к решению будущих единых теорий. При этом необходимы надежные и точные методы, чтобы было можно выделять более слабые взаимодействия на фоне более сильных. По мере продвижения в глубь кварков все труднее будут реальные эксперименты и тем ценнее, по необходимости, будут эксперименты численные. С помощью численных экспериментов можно будет делать точные предсказания в области низких энергий, где эксперименты также можно делать точными. Проверая эти предсказания, можно будет выбирать между различными гипотезами о взаимодействии на сверхмалых расстояниях.

Есть и другой аспект. Проблема количественного решения КХД — это рекордно сложная проблема, своего рода Эверест теоретической физики. Она требует объединенных усилий представителей разных областей — теоретической физики, вычислительной математики и кибернетики. Обычно в результате решения проблемы выигрывают все смежные области. В данном случае можно ожидать, что эта проблема стимулирует развитие вычислительной техники.

В США уже созданы первые специализированные компьютеры для КХД. Они строятся в виде решетки параллельно работающих компьютеров и на порядок превосходят «Край-1» по памяти и быстродействию, будучи при этом гораздо проще и дешевле. Это достигается за счет узкой специализации, но авторы этих проектов считают, что они будут применимы не только для КХД, но и в широком круге теоретических задач физики и техники. Так или иначе, но на Западе этот круг исследований привлекает сейчас большое внимание.

Перейдем теперь к описанию численных методов КХД. Таких методов пока известно три: метод разложения сильной связи, метод рекурсионных уравнений и метод Монте-Карло. Все они в качестве необходимого технического приема используют 4-мерное евклидово пространство и аппроксимируют его гиперкубической решеткой.

Евклидово пространство возникает так. Вместо привычной в квантовой механике S -матрицы ($S = \exp(-iHt)$) рассматривается температурная матрица плотности $\rho = \exp(-H/T)$, соответствующая аналитическому продолжению с действительного времени на мнимое. Преимущество матрицы плотности в том, что суммы по промежуточным состояниям абсолютно сходятся. Устремив $T \rightarrow 0$, можно извлечь из матрицы плотности

информацию о спектре низколежащих возбуждений, а вводя соответствующие внешние поля — о других низкоэнергетических параметрах: магнитных моментах, константах β -распада и т. д.

К S -матрице можно вернуться аналитическим продолжением на мнимые T , но на современном уровне точности численных экспериментов об этом говорить рано. Наиболее удобная для численных методов величина — это след матрицы плотности, для которого лет 40 назад была получена знаменитая формула Фейнмана — Каца

$$Z = \text{tr } \rho = \int DA \exp \left(\int_0^{T^{-1}} dx_4 \int d^3x \mathcal{L}_E \right), \quad A \left(\frac{1}{T} \right) = A(0); \quad (2)$$

здесь \mathcal{L}_E — евклидов лагранжиан, в котором после замены $t = -ix_4$ изменился знак кинетической энергии: если $\mathcal{L} = E^2 - \mathbf{H}^2$, то $\mathcal{L}_E = -E^2 - \mathbf{H}^2$. Кварки пока не рассматриваем, а будем изучать флуктуации поля. Эти флуктуации выражаются в том, что векторный потенциал A_μ может принимать любые значения, с вероятностью, пропорциональной экспоненте в формуле (2). Поскольку эта экспонента ограничена и убывает при больших напряженностях поля, то этому интегралу, в отличие от фейнмановского интеграла в пространстве Минковского, можно придать строгий математический смысл.

Для этого нужна процедура аппроксимации функционального интеграла многомерным, подобно тому, как обычный интеграл аппроксимируется римановой суммой. Как было впервые осознано Вильсоном, для того чтобы сохранить явление удержания кварков, такая аппроксимация должна сохранять калибровочную инвариантность. На решетке калибровочная инвариантность формулируется следующим образом. Векторный потенциал сопоставляется середине ребра (xy) и вводится матрица переноса $u_{xy} = \exp [ig(y_\mu - x_\mu) A_\mu((x+y)/2)]$. В КХД векторный потенциал является 3×3 -эрмитовой матрицей, а матрица переноса — унитарной. Калибровочные преобразования умножают матрицу переноса слева на $s^{-1}(x)$, и справа — на $s(y)$. Нетрудно проверить, что при $x \rightarrow y$ эти обобщенные калибровочные преобразования переходят в обычные: $A_\mu(x) \rightarrow s^{-1}(x) (A_\mu(x) + (ig)^{-1} \partial/\partial x_\mu) s(x)$.

Решеточный аналог напряженности — это матрица переноса по элементарному замкнутому контуру, вокруг грани решетки $u_\square = u_{xy} u_{yz} u_{zt} u_{tx}$. Решеточный аналог действия, т. е. интеграла по пространству от функции Лагранжа, — это следующая сумма по всем граням решетки:

$$S = \sum_\square g_0^2 \text{tr} (u_\square - 1). \quad (3)$$

Нетрудно убедиться, что в пределе нулевого шага решетки новое определение переходит в старое. Осталось определить меру интегрирования по матрицам переноса, которые теперь выступают в роли динамических переменных. Требование калибровочной инвариантности приводит к тому, что эта мера должна совпадать с так называемой инвариантной мерой Хаара, хорошо изученной математиками.

Впервые решеточные калибровочные теории рассматривались Вегнером в 1971 г. в статистической механике. В 1974 г. Вильсон переоткрыл их, обобщил на теории Янга — Миллса и применил к проблеме конфайнмента. Выдающаяся работа Вильсона на много лет определила развитие теории. Важную роль играет введенный Вильсоном потенциал между тяжелыми кварками

$$V(R) = -\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln W(R, L), \quad (4)$$

здесь

$$W(R, L) = \left\langle \text{tr} \prod_{\square} u_{xy} \right\rangle \quad (5)$$

— усредненный по флуктуациям след матрицы переноса по прямоугольному контуру, одна из сторон которого L стремится к бесконечности. Конфайнмент соответствует росту этого потенциала с расстоянием R .

Используя разложение по $1/g_0^2$, Вильсон показал, что при достаточно больших g_0^2 W убывает как $\exp(-\text{площадь внутри контура})$. Тем самым потенциал растет как σR , где σ — коэффициент перед площадью в экспоненте в W . Иначе говоря, этот коэффициент имеет смысл силы между удаленными тяжелыми кварками.

Разложение по $1/g_0^2$ исследовалось затем более подробно Балианом, Друффом и Ициксоном, а также Когутом и Саскиндом в 1974 г. Оказалось, что оно имеет ограниченную сходимости, так что при достаточно малых g_0^2 можно было ожидать фазового перехода, освобождающего кварки.

Между тем в реальном мире нас интересуют именно малые $g_0^2 = g^2(a) = C/\ln(r_c/a)$, поскольку g_0^2 имеет смысл эффективного заряда на решеточном расстоянии. Таким образом, центральным вопросом теории стал вопрос о поведении силы $\sigma(g_0^2)$ при уменьшении затравочного заряда g_0^2 . Если σ остается конечной при малых g_0^2 , то кварки удерживаются, а если начиная с некоторых $g_0^2 < g_0^2_c$ $\sigma = 0$, то кварки вылетают.

Для решения этого вопроса автором в 1975 г. была разработана приближенная процедура функционального интегрирования, не использующая разложение в ряд ни по $1/g_0^2$, ни по g_0^2 . Качественную идею этого метода можно пояснить так. Рассмотрим замкнутый объем в 4-пространстве, например 4-куб, и проинтегрируем по всем полям, т. е. по всем матрицам переноса внутри объема. Мы получим так называемый Z-функционал, зависящий от полей на границе объема. Если теперь взять два соседних объема и проинтегрировать по полям на перегородке между ними произведение Z-функционалов обоих объемов, то получится Z-функционал для объединенного объема.

Это дает нелинейное функциональное уравнение для Z-функционалов — так называемое рекурсионное уравнение. В такой форме уравнение является точным, но из-за бесконечного числа степеней свободы оно не допускает применения численных методов. Была разработана процедура выделения главных степеней свободы, которые в калибровочной теории соответствуют матрицам переноса по «типичным» контурам на границе объема. После выделения главных степеней свободы получается замкнутое уравнение достаточно простой структуры, допускающее численное решение. В области малых пространственных масштабов оно воспроизвело известные результаты теории возмущений, включая логарифмический закон для эффективного заряда. В области расстояний $r \gg r_c$ получились новые волнующие результаты.

Оказалось, что силы между кварками действительно выходят на постоянный предел, причем этот переход от кулоновских сил к постоянным происходит очень резко, в узком интервале расстояний. Сила σ экспоненциально зависит от g_0^2 :

$$\sigma \sim a^{-2} \exp\left(-\frac{2C}{g_0^2}\right) = a^{-2} \exp\left(\ln \frac{a^2}{r_c^2}\right) = r_c^{-2}, \quad (6)$$

и остается конечной при $a = 0$, т. е. в локальной теории. Таким образом, не происходит фазового перехода, освобождающего кварки. Замеченная в разложениях по g_0^2 неаналитичность связана с резким переходом от кулоновских сил к постоянным, а не с освобождением кварков. Это было первым теоретическим указанием на удержание кварков в локальной теории и первым вычислением вне рамок теории возмущений.

Однако рекурсионное уравнение было не точным, а приближенным. Его точность была порядка 30%. Для уточнения уравнения в работах Каданова, Мартинелли, Паризи и других была построена специальная теория возмущений, нулевым приближением которой было это уравнение. Дополнительные степени свободы включаются постепенно, так что в каждом порядке число степеней свободы остается конечным. С технической точки зрения эта теория возмущений непростая, и пока лишь для двумерных моделей удалось учесть первые два порядка и убедиться, что точность повышается.

Уже совсем недавно Тамбулис доказал неравенство, согласно которому рекурсионное уравнение дает нижнюю границу для силы $\sigma(g_0^2)$. Таким образом, рекурсионное уравнение дает возможность доказать удержание кварков.

Однако для практических расчетов в КХД оказалось проще пользоваться непосредственным вычислением интеграла методом Монте-Карло¹. Основанием для применения метода Монте-Карло служило обнаруженное в рекурсионном уравнении явление кроссовера. А именно, поскольку сила между кварками выходит на постоянный предел очень резко, без какого-либо промежуточного закона, то на решетке, всего в несколько раз большей r_c , уже будет достигаться предел бесконечного объема. Шаг a решетки при этом может быть всего в несколько раз меньше r_c , и уже эффективная константа на решетке будет достаточно мала, чтобы наступал локальный предел.

Вначале подобные соображения казались фантастикой. Работа, в которой в 1976 г. обосновывался и предлагался метод Монте-Карло в решеточных калибровочных теориях для вычисления спектра масс адронов, была отклонена редакцией ЖЭТФ на том основании, что надо сначала проделать эти вычисления. В то время это было технически недостижимо, поэтому работа так и не была напечатана.

Однако идея не умерла. Она возродилась в 1979 г., когда Кройц в США провел первое успешное вычисление $\sigma(g_0^2)$. Подтвердилась качественная картина кроссовера. Его данные хорошо описываются экспоненциальным законом. Вычисления проводились на решетке из 10^4 точек для группы SU(2).

С тех пор начался взрыв активности. Уже опубликовано несколько сотен работ и включаются все новые группы исследователей. Это объясняется тем, что метод Монте-Карло очень прост для программирования: вся проблема перегружается с человеческого мозга на электронный. Недостатком является медленная сходимости: статистическая ошибка убывает всего лишь как квадратный корень из времени. Есть и систематическая ошибка, связанная с конечностью решетки. Поскольку требуемая память растет как четвертая степень размера решетки, то это и является самым узким местом.

До тех пор, пока не включаются кварки, требования к ЭВМ не столь велики. Можно работать с решетками 8^4 и даже 4^4 и получать неплохие результаты. Это достижимо для небольших машин: VAX-11/780 и нашей ЕС-10-60. Вычислялись практически все низкоэнергетические величины: спектр масс глюонов, критическая температура вакуума, при которой освобождаются кварки, плотность энергии и топологического заряда в вакууме. Во всех случаях получались разумные результаты, согласующиеся друг с другом у различных групп в пределах ошибок порядка 10—20%.

Реальные трудности начинаются с появлением кварков. Не удалось придумать алгоритм Монте-Карло для ферми-полей, поэтому приходится сначала вычислять функции Грина кварков в калибровочных полях на решетке, а потом усреднять по конфигурациям полей. При этом большая часть машинного времени уходит на обращение огромных матриц, соответствующих функциям Грина. Кроме того, в присутствии кварков решетку надо брать гораздо больше, чтобы не чувствовались границы.

Поэтому, хотя в работах Паризи и др. были получены разумные значения спектра масс адронов, эти результаты нельзя считать окончательными из-за эффектов конечности решетки. По-видимому, решетка $10^3 \times 20$, использованная в одном из последних расчетов итальянской группы, все еще недостаточно велика. Заметим, что в этом расчете было израсходовано около 30 часов «Крэй-1», принадлежащего Министерству электричества Франции.

Таким образом, метод Монте-Карло в КХД с кварками работает на пределе возможностей современных компьютеров и пока не дает надежных чисел для спектра масс. Для этого надо было бы достичь быстродействия 10 млрд. операций в секунду при памяти в несколько миллионов 8-байтных слов. Такой суперкомпьютер планируется на 1987 г. фирмой CDC по словам ее вице-президента Шмидта.

Альтернативой является создание специализированных машин, в которых будут работать параллельно несколько сот компьютеров, отвечающих каждый за свой участок решетки. В только что построенной машине Криста и др. в Колумбийском университете под руководством хост-компьютера VAX-11/780 работает двумерная решетка из 256 узлов (память + процессор). Каждый узел отвечает за свою плоскость 4-мерной решетки, обладает памятью 128 кбайт и стоит около 2—3 тыс. долларов. Скорость работы машины около 4 млрд. операций в секунду. Она предназначена для расчетов спектра адронов на решетках 16^4 — 32^4 .

В нашей стране решеточными калибровочными теориями занимается человек 20. Мы остро нуждаемся в машинном времени, которое приходится доставать окольными путями. К сожалению, несмотря на то, что идея этих расчетов была высказана у нас на 3 года раньше американцев, различные технические препятствия помешали нам реализовать это преимущество.

Для того чтобы ликвидировать отставание, нужно предоставить теоретикам для расчетов КХД хотя бы один современный быстродействующий компьютер. Нужно сотрудничество теоретиков с инженерами для создания специализированных компьютеров типа решетки Криста. Наконец, нужно искать более совершенный численный метод, чем Монте-Карло, комбинируя численные методы с аналитическими. Многие возлагают большие надежды на методы, использующие уравнения движения для следов матриц переноса. Возможно, именно на этом пути будет создана эффективно работающая количественная теория, использующая численные методы только на некоторых этапах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макеев Ю. М. — УФН, 1984, т. 143, с. 161 (в данном номере).

[681.142 + 539 2] (048)

Е. Г. Максимов. Использование ЭВМ в физике конденсированного состояния. Последние годы характеризуются все более широким проникновением вычислительной техники во все области человеческой деятельности. Как физика в целом, так и физика конденсированного состояния не остались в стороне от этого всеобщего процесса ЭВМизации. Отличительной чертой современного этапа использования ЭВМ в физике конденсированного состояния является превращение вычислительных машин в полноправного участника как экспериментальных, так и теоретических исследований. Происходит рождение нового направления в физике, или, точнее сказать, новой отрасли физики — вычислительной физики — со своими собственными методами и способами изучения природы, отличными, вообще говоря, от методов экспериментальной и теоретической физики. Мы, к сожалению, существенно отстаем от Запада в развитии этого направления. Причин для этого по крайней мере две. Первая причина — объективная, она связана с нашим отставанием от Запада в развитии вычислительной техники. Существует, однако, и вторая причина, субъективного плана, — это недооценка роли и возможностей вычислительной физики со стороны некоторой части нашей научной общественности.

В кратком получасовом докладе, естественно, нет возможности обсудить все аспекты вычислительной физики конденсированного состояния. Можно лишь кратко упомянуть о быстром развитии методов молекулярной динамики и Монте-Карло, с помощью которых достигнут значительный прогресс в понимании физики жидкого состояния, в расчете свойств сильно неидеальной классической и квантовой плазмы и в вычислении критических индексов фазовых переходов. В самом докладе на примере достаточно узкого вопроса физики конденсированного состояния, а именно, на проблеме расчета электронных свойств кристаллов будет показано развитие и совершенствование как теоретических подходов к этой проблеме, так и наших вычислительных возможностей.

Одночастичное описание электронной системы кристалла с давних пор является одной из очень популярных моделей, используемых в физике твердого тела. Довольно давно были развиты мощные и эффективные методы¹ решения уравнения Шрёдингера для электрона в периодическом поле $V(r)$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (1)$$

Расчеты зонной структуры электронов, в рамках этого уравнения, были проведены для большого числа металлов, полупроводников и диэлектриков. Наибольшее развитие такие расчеты получили в 60—70-е годы в связи с созданием концепции псевдопотенциала². Все эти расчеты страдали, однако, одним существенным недостатком. Отсутствовало строгое обоснование для соответствующего одночастичного описания системы сильно взаимодействующих электронов. Отсутствовала, по этой же причине, и строгая процедура вычисления параметров потенциала (или псевдопотенциала) из «первых принципов». Обычно параметры эмпирического потенциала подбирались из сравнения расчетных и экспериментальных данных для какого-нибудь явления. После этого уже рассчитывались и другие эффекты. Получающиеся при этом результаты на удивление неплохо описывали целый ряд физических свойств кристаллов.

Разработанный в последние годы, начиная с ранней работы Кона и Хоэнберга³, метод функционала плотности (МФП) позволил подвести строгий теоретический базис как под использование вообще одночастичного описания электронов в кристалле, так и под вывод самого потенциала $V(r)$ из «первых принципов». В рамках этого метода было строго доказано, что задача расчета энергии основного состояния и термодинамических свойств системы сильно взаимодействующих электронов может быть сведена к решению одночастичной задачи поведения электрона во внешнем самосогласованном потенциале, зависящем лишь от распределения плотности электронов. При этом самосогласованный потенциал $V(r)$ определяется следующим выражением:

$$V(r) = V_{\text{ion}}(r) + I^2 \int \frac{n(r') dr'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{\text{xe}}(r); \quad (2)$$

здесь $V_{\text{ion}}(r)$ — кулоновский потенциал ионов, второе слагаемое — хартриевский потенциал электронов и $V_{\text{xe}}(r)$ — обменно-корреляционный потенциал. Точный вид $V_{\text{xe}}(r)$ неизвестен. Однако, опираясь на успехи в изучении однородного взаимодействующего газа, можно сформулировать различного рода приближенные выражения для $V_{\text{xe}}(r)$.

Используя потенциал (2) и решая уравнение Шрёдингера (1), можно вычислить энергию электронов при различных объемах кристалла для разных кристаллических структур. Это позволяет рассчитать энергию связи кристалла, его упругие модули, фазовую диаграмму и целый ряд других свойств. Проведенные в последнее время расчеты⁴ показывают, что все эти характеристики могут быть вычислены без использования каких-либо подгоночных параметров, а лишь из знания его атомного номера, с точностью не хуже 10%.

Вообще говоря, не существует никакого обоснования для использования одноэлектронных состояний, полученных в рамках МФП, для расчета кинетических свойств электронов или их динамических функций отклика. Как показывают, однако, исследования, в частности нашей группы, расчет электросопротивления металлов за счет рассеяния на фононах, а также их оптических свойств с использованием электронного спектра, полученного в МФП, также дает неплохое согласие с экспериментальными^{5, 6}. Аналогичные расчеты для полупроводников и диэлектриков оказываются гораздо более далекими от эксперимента, хотя энергия основного состояния считается одинаково хорошо и в металлах, и в полупроводниках, и в диэлектриках.

Приведенный краткий обзор современного состояния в области микроскопических расчетов свойств кристаллов ясно показывает необходимость и важность соответствующих исследований, а также актуальность дальнейших как вычислительных, так и теоретических работ в этом направлении.

ЛИТЕРАТУРА

1. З а й м а н Дж. Вычисление блоховских функций.— М.: Мир, 1973.
2. Х е й н е В., К о э н М., У э й р Д. Теория псевдопотенциала.— М.: Мир, 1973.
3. H o h e n b e r g P., K o h n W.— Phys. Rev. Ser. B, 1964, v. 136, p. 834.
4. M o r u z z i V. L., J a n a k J. F., W i l l i a m s A. R. Calculated Electronic Properties of Metals.— N.Y.; Pergamon Press, 1978.
5. С а в и ц к и й Е. М., М а з и н И. И., У с п е н с к и й Ю. А.— ДАН СССР, 1983, т. 268, с. 858.
6. U s p e n s k i i Y. A., M a k s i m o v E. G., M a z i n I. I. R a s c h k e e v S. N.— Zs. Phys. (in press).

53(048)

НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ АКАДЕМИИ НАУК СССР

(26 — 27 сентября 1983 г.)

26 и 27 октября 1983 г. в конференц-зале Физического института им. П. Н. Лебедева АН СССР состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

26 октября

1. Д. С. Чернавский. Туннельный транспорт электронов в биологии.
2. А. Б. Рубин. Молекулярные механизмы переноса электронов в биологических системах
3. В. И. Гольданский, Ю. Ф. Крупянский. Динамика биополимеров и стеклообразная модель белков и ДНК.

27 октября

4. Б. А. Волков, А. А. Горбачевич, Ю. В. Копаев. Аномальные магнитные свойства систем со спонтанным током.
 5. В. Г. Веселаго. Фотоматетизм.
- Краткое содержание пяти докладов приводится ниже.

[537.31 + 57] (048)

Д. С. Чернавский. Туннельный транспорт электронов в биологии. В биологических процессах, таких как фотосинтез и образование АТФ в митохондриях (так называемое дыхательное фосфорелирование) первичным носителем энергии является возбужденный электрон. Он переходит из одной макромолекулы в другую (на расстояние порядка $L \approx 15-20 \text{ \AA}$) за счет туннельного эффекта. При этом энергия электрона частично диссипирует, но значительная часть переходит в иные формы: создается градиент хеомосмотического потенциала и (или) образуются энергизованные протоны в локальных областях внутри белково-мембранного комплекса; в конце концов синтезируется АТФ.

Выяснение механизма трансформации энергии электрона в иные формы — одна из актуальных задач биофизики; туннельный эффект играет в этом процессе ведущую роль.

Цель предлагаемого сообщения — изложить существующие представления о туннельном транспорте электрона и трансформации его энергии в биологии (экспериментальная ситуация освещена в докладе А. Б. Рубина).

Специфика туннельного транспорта в биологии заключается в следующем.

Роль акцентирующей моды (далее — АМ), которая принимает часть энергии электрона, выполняют нормальные колебания заряженной группы (или групп) в белковой макромолекуле.

Белковые макромолекулы отличаются от объектов неживой природы тем, что они устроены целесообразно, приспособлены к выполнению определенной функции (что обеспечивается при их синтезе на основе генетической информации); структура их гетерогенна, аperiodична, но не хаотична. Можно сказать, что белки-ферменты — это конструктивные системы, имеющие малое число степеней свободы, которые ответственны за выполнение функций.

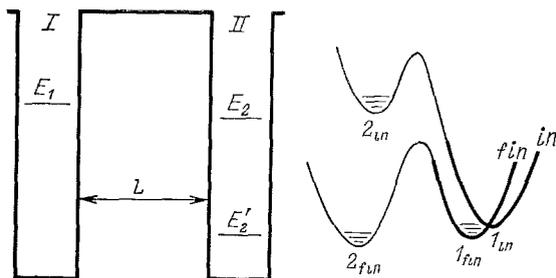
В связи с изложенным непосредственное перенесение результатов теорий, развитых для описания периодических или хаотических систем, на биологические объекты не всегда возможно. Более оправданно использование физической модели, адекватной рассматриваемому процессу.

Такая модель, представленная на рисунке, была сформулирована и исследована в работах ¹⁻⁵; потенциальные прямоугольные ямы соответствуют электронофильным группам белковых макромолекул. Кривые in и fin представляют свободные энергии АМ (с учетом взаимодействия ее с электроном), когда электрон локализован в яме I (до туннелирования) и в яме II (после туннелирования). Переход электрона сопровождается возбуждением нормальных колебаний, которые быстро затухают, передавая энергию в тепло. В гармоническом приближении (кривые in и fin — параболы — жирные линии на рис. 1) рассмотрены предельные случаи сильной и слабой связи. В последнем случае скорость процесса велика только, если уровни электронов E_1 и E_2 близки друг к другу: $E_1 - E_2 = \delta E \approx \hbar\omega \leq 0,1 \text{ эВ}$ (так называемое «резонансное» туннелирование). Это свойство означает, что переходы между уровнями с большим сбросом энергии (большой диссипацией) при «резонансном» туннелировании кинетически запрещены. Это возможно лишь в отсутствие полярного окружения.

В обоих случаях теория эффекта близка к теории безызлучательной релаксации⁶ и к теории процессов при электролизе⁷.

Трансформация энергии в иную форму возможна, если а) акцентирующая мода ангармонична, так что имеется два минимума (соответствующих стабильному и метастабильному состояниям — тонкие линии на рисунке), и б) в состояниях in и fin стабильны разные состояния. Переход состоит из следующих стадий: I) туннелирование электрона с уровня E_1 на E_2 при этих АКМ переходит из 1_{in} в 1_{fin} ; и II) — переход АКМ в состояние 2_{fin} ; при этом электрон остается в яме II, но уровень его понижается с E_2 до E'_2 .

Вторая стадия представляет собою конформационный переход в макромолекуле, проходящий по выделенной и целесообразно организованной, «машинной»⁸, степени свободы; его можно также рассматривать как фазовый переход в конструкции⁹. Весь процесс является электронно-конформационным переходом (термин предложен Волькенштейном¹⁰). Аналогом этого процесса в физике является образование полярона.



В реальных макромолекулах состояния 1_{fin} , 2_{fin} и т. д. содержат много макросостояний, блуждание по которым описывается в рамках модели «броуновского осциллятора»¹¹. Переход между состояниями 1_{fin} и 2_{fin} также может быть многостадийным (барьер изрезанным), и тогда его кинетика описывается в рамках модели ограниченной диффузии¹¹.

Для завершения цикла трансформации энергии необходимо присутствие третьего переносчика электронов (третьей ямы), уровень которого E_3 ниже уровня E'_2 , но близок к нему. Тогда протекают следующие две стадии: III — туннелирование электрона с E'_2 на E_3 , при этом АКМ переходит в метастабильное (энергизованное) состояние; IV — использование энергии метастабильности и возвращение АКМ в исходное состояние 1_{in} (этот процесс уже не связан с туннелированием и рассматривается особо).

Весь четырехстадийный цикл рассмотрен в работах^{2, 12, 13}. Он возможен лишь в условиях «резонансного» туннелирования; в противном случае (сильная связь) стадия III осуществляется сразу после стадии I (минуя стадию II) и вся энергия диссипирует. Приложение этой схемы к конкретному процессу энергизации протонов содержится в работе¹⁴.

Аналогичный цикл внутри одной макромолекулы, содержащей две электрофильных группы, в одной из которых квант света может перевести электрон в возбужденное состояние, рассмотрен в^{2, 15}. Приложение этого цикла к процессу трансформации энергии в бактериородопсине обсуждается в^{16, 17}.

Таким образом, теория туннельного транспорта электронов в биологии (с учетом специфики объекта) достаточно развита и используется при исследовании конкретных процессов.

ЛИТЕРАТУРА

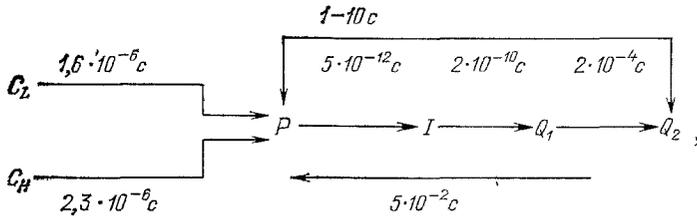
1. Григоров А. Н., Чернавский Д. С. — Биофизика, 1982, т. 17, с. 195.
2. Чернавская Н. М., Чернавский Д. С. Туннельный транспорт электронов в фотосинтезе. — М.: Из-во Моск. ун-та, 1977.
3. Norfield J. J. — Proc. Nat. Ac. Sci. USA, 1974, v. 71, p. 3640.
4. Shaitan K. V., Rubins A. B. — J. Theor. Biol., 1980, v. 86, p. 203.
5. Jortner J. — J. Chem. Phys., 1976, v. 64, p. 4860.
6. Freed K. F., Jortner J. — J. Chem. Phys., 1970, v. 52, p. 6272.
7. Догонадзе Р. П., Кузнецов А. М. Физико-химическая кинетика. — М.: ВИНТИ, 1973.
Левич В. Г., Кузнецов А. М. — Теор. и эксперим. химия, 1970, т. 6, с. 2.
8. Хургин Н. И., Чернавский Д. С., Шноль С. Э. — Мол. биол., 1967, т. 1, с. 419.
9. Гольданский В. И., Кононенко А. И., Рубин А. Б., Фролов Е. Н., Чернавский Д. С. — ДАН СССР, 1981, т. 257, с. 491.
10. Волькенштейн М. В. Общая биофизика. — М.: Наука, 1978.
11. Шайтан К. В., Рубин А. Б. — Мол. биол., 1980, т. 14, с. 1323.
12. Blumenfeld L. A., Chernavskii D. S. — J. Theor. Biol., 1983, v. 39, p. 1.
13. Блюменфельд Л. А. Проблемы биологической физики. — М.: Наука, 1974.

14. Чернавская Н. М., Чернавский Д. С., Ягушинский Л. С.— Биофизика, 1982, т. 27, с. 114.
 15. Chernavskaya N. M., Chernavskii D. S.— Photosynthetica, 1981, v. 15, p. 195.
 16. Chernavskii D. S., Dumaev A. K., Savranskii V. V., Chernavskaya N. M., Chirkov I. B., Melnik E. I., Vasil'ev G. V., Duykova T. V., Malina Z. A.— P. N. Lebedev Physical Institute Preprint. No. 151.— Moscow, 1982.
 17. Zubov B. V., Murina T. M., Prokhorov A. M., Sulimov N. A., Chernavskaya N. M., Chernavskii D. S., Chizhov I. V.— Biochim. and Biophys. Acta, 1983 (in press).

[537 31 + 57] (048)

А. Б. Рубин. Молекулярные механизмы переноса электрона в биологических системах. В основе главных биоэнергетических процессов — фотосинтеза и дыхания — лежит транспорт электронов между макромолекулярными переносчиками, погруженными в мембраны. Прямые измерения, проведенные методами флуоресценции и абсорбционной (лазерной) спектроскопии, позволили найти характерные времена переноса электрона в реакционных центрах (РЦ) фотосинтетических пурпурных бактерий¹⁻⁴.

Общая схема переноса в РЦ и ближайшем донорно-акцепторном окружении имеет вид



где C_H , C_L — высоко- и низкопотенциальные цитохромы, P — фотоактивный димер бактериохлорофилла, I — бактериофеофитин, Q_1 и Q_2 — первичный и вторичный акцепторы хинонового состояния, P переводит к отрыву электрона за $5 \cdot 10^{-12}$ с с первого синглетного состояния и переносу его за $2 \cdot 10^{-10}$ с на акцептор Q_1 , через посредническую молекулу I , а далее на Q_2 . Положительная дырка в P заполняется электроном от цитохромов C_H и C_L за время порядка 10^{-6} с. Квазатовый выход разделения зарядов в реакции $PQ_1 \rightarrow P^+Q_1^-$ составляет $\approx 100\%$ ⁵. Обратные реакции переноса идут намного медленнее прямых, что обеспечивает высокую эффективность всего транспорта электронов по цепи^{1,4}.

Температурная зависимость реакций прямого переноса электрона на участках $C_L \rightarrow P$, $Q_1 \rightarrow Q_2$ характеризуется двухфазной кривой с точкой перегиба при $-100 \div -140^\circ\text{C}$ и $-50 \div -70^\circ\text{C}$ соответственно, ниже которой перенос электрона от температуры практически не зависит^{1,6}. В той же температурной области, где наблюдаются изменения эффективности процесса $Q_1 \rightarrow Q_2$, обнаружено изменение внутримолекулярной подвижности белка РЦ, измеренное с помощью методов мессбауэровской спектроскопии, ЭПР (спиновые зонды), флуоресцентных меток^{7, 8}. Анализ показывает, что перенос электрона в РЦ происходит по механизму неупругого туннелирования, где электронные переходы сопряжены с колебательными и конформационными степенями свободы^{6, 7, 8, 10}.

Туннелируя в молекулу-переносчика, электрон задерживается там, теряя часть энергии за 10^{-12} с ($\approx 0,1$ эВ) по колебательным степеням на акцептирующей моде. Однако изменение зарядового состояния переносчика может вызывать и более глубокие конформационные изменения в белковой структуре, проходящие за $\approx 10^{-4} - 10^{-5}$ с. Обнаружено, что попадание электрона на Q_1 приводит к такого рода изменениям в РЦ; в этом случае затрудняется возвращение электрона на P ¹. Понижение температуры и уменьшение содержания воды в РЦ резко замедляют конформационные изменения. При этом наблюдается аномальная температурная зависимость, когда скорость обратной реакции $P \leftarrow Q_1$ увеличивается в 1,5—3 раза с понижением температуры от $+25^\circ$ до -150° и уменьшением влажности до 10% и менее. Перенос электрона на этапе $Q_1 \rightarrow Q_2$ еще в большей степени регулируется конформационной подвижностью вторичного хинона Q_2 . Этот переносчик совершает движения в пределах участка белка РЦ вблизи Q_1 и образует с ним контактную конфигурацию, обеспечивающую перенос электрона от Q_1 на Q_2 ^{7, 8}. На тех участках цепи ($P \rightarrow I$, $C_H \rightarrow P$), где контактная конфигурация между переносчиками уже исходно образована, перенос электрона от температуры практически не зависит^{1, 7, 8, 10}. Механизм внутримолекулярной подвижности белка, лежащей в основе конформационных перестроек, носит характер ограниченной диффузии. Таким образом, электронно-конформационные взаимодействия обеспечивают эффективный туннельный перенос, сопровождаю-

пийший одновременно такими конформационными изменениями в белковой структуре переносчиков, которые способствуют образованию между ними функционально активных контактных конфигураций^{1, 7-10}.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рубин А. Б.— Успехи совр. биол., 1980, т. 90, с. 163.
2. Кононенко А. А., Рашченко В. З., Рубин А. В., Рубин Л. В.— In: Proc. of the 2rd Intern. Symposium of Ultrafast Phenomena in Spectroscopy.— Reinhardtsbrunn, GDR, 1980.— P. 363.
3. Holten D., Hoganson C., Windsor M. W., Schenk C. C., Parson W. W., Migus A., Fork R. L., Shank C. V.— Biochim. and Biophys. Acta, 1980, v. 592, p. 461.
4. Шувалов В. А., Красновский А. А.— Биофизика, 1981, т. 26, с. 544.
5. Clayton R. K. Photosynthesis: Physical Mechanisms and Chemical Patterns.— Lnd.; N.Y.; Cambridge Univ. Press.— 1980.
6. Devault D.— Quart. Rev. Biophys., 1980, v. 13, p. 387.
7. Рубин А. В., Кононенко А. А., Шаитан К. В., Ликтенштейн Г. Ж., Голдanskii В. Ж., Крупянский Ю. Ф., Фролов Е. Н.— In: Paramagnetic Models of Drugs and Biochemicals/Ed. R. J. Zdanov, Inc. Boca Raton, Florida, U.S.A.: CRC Press, 1984.
8. Крупянский Ю. Ф., Бадэ Д., Шаркевич Ж. В., Успенская Н. Я., Кононенко А. А., Суздальев Ж. П., Парак Ф., Голдanskii В. И., Мёссбауэр Р. Л., Рубин А. В.— Biophys. Structure Mech., 1983.
9. Шаитан К. В., Рубин А. В.— J. Theor. Biol., 1980, v. 86, p. 203.
10. Петров Э. Г., Харкянен В. Н., Чаморовский С. К., Кононенко А. А., Рубин А. Б.— Биофизика, 1983, т. 28, с. 9.

57(048)

В. И. Гольданский, Ю. Ф. Крупянский. Динамика биополимеров и стеклообразная модель белков и ДНК. Используя в качестве основных характеристик вещества наличие (+) или отсутствие (—) упорядоченности (т. е. определенности строения), периодичности и геометрической однозначности основного состояния (здесь (+) соответствует стремление энтропии к нулю при $T \rightarrow 0$, а (—) неравенству $S \neq 0$, $T \rightarrow 0$), можно заключить, что идеальный кристалл (+++) и стекло (—) являются полными антиподами. Между тем, анализ динамических свойств биополимеров позволяет прийти к выводу, что им присуще весьма своеобразное сочетание свойств кристаллов и стекол.

Как известно, Э. Шрёдингер уже около сорока лет назад¹ охарактеризовал белки как аperiодические кристаллы, рассматривая их упорядоченность в качестве основного фактора функциональной активности. В дальнейшем стало ясно, что в проявлении реакционной способности белков не менее важную роль играют и их динамические свойства²⁻⁴.

Долгое время на основе традиционного рентгеноструктурного анализа белковые глобулы рассматривались как молекулы, имеющие геометрически однозначное положение атомов в основном состоянии (+ — +). Для описания конформационной подвижности, наблюдавшейся, например, в экспериментах по Н — D обмену или тушению люминесцентных меток, обычно рассматривались короткоживущие флуктуации основной структуры, обладающие, как и всякие возбужденные состояния, существенно меньшими статистическими весами.

Принципиально новый подход к динамической структуре белков возник с появлением рентгенодинамического анализа (РДА)^{5, 6}. Этот метод позволил определить среднеквадратичные амплитуды $\langle x^2 \rangle$ смещений атомов остова и боковых цепей белковых глобул, обнаружить наличие «квазитвердых» ($\langle x^2 \rangle \leq 0,04 \text{ \AA}^2$) и «жидкообразных» ($\langle x^2 \rangle$ вплоть до $\sim 1 \text{ \AA}^2$) областей этих глобул, то есть конформационной гетерогенности в биополимерах, и изучить температурную зависимость $\langle x^2 \rangle$ в пределах от 300 К⁵ до 80 К⁷. Метода РДА позволил сильно расширить представления о динамических свойствах белков и установить наличие конформационных подсостояний (КП) или — лучше сказать — квазивырожденных конформационных состояний (КВКС)⁵, что соответствует обозначению молекул биополимеров как (+ — —). Под КП понимаются разновидности одной и той же основной гросс-структуры данной белковой молекулы, эквивалентные или почти эквивалентные по энергии и лишь немного различающиеся в локальных конфигурациях (обратимые повороты относительно σ -связей, сдвиги водородных мостиков, флуктуационный разрыв и восстановление водородных связей и, как следствие этого, небольшие сдвиги молекулярных крупных групп, фрагментов относительно других частей глобулы). Именно переходы между КВКС обуславливают большие значения $\langle x^2 \rangle$, наблюдавшиеся методом РДА. Концепция КВКС и переходов между ними позволила объяснить резкий излом температурной зависимости вероятности эффекта Мёссбауэра f' , ее быстрое падение при $T \geq 200 \text{ K}$, отмеченное впервые для белков еще в 1973 г.⁸ Эта концепция получила

количественное подтверждение в новых экспериментах по гамма-резонансной спектроскопии (ГРС)⁹ и рэлеевскому рассеянию мёсбауэровского излучения (РРМИ)^{10, 11}. Все данные, полученные методами РДА, ГРС и РРМИ, трактовались, однако, на основе представлений, что переходы между КВКС происходят надбарьерным образом.

Между тем легко прийти к выводу, что наличие КВКС должно привести к появлению родства между не только структурными характеристиками биополимера (+ — —) и стекла (— — —), но и их динамическими свойствами.

Согласно модели Андерсона, Гальперина, Варма¹² и Филипса¹³ характерная для аморфных тел линейная зависимость теплоемкости от температуры, наблюдавшаяся при $T \approx 0,1-4$ К на многих примерах¹⁴, связана с неравновесностью, наличием остаточной энтропии при $T \rightarrow 0$, а следовательно, и с наличием квазиравновесных положений (КРП) для некоторых атомов или групп атомов в стеклах. Переход между этими положениями происходит при низких температурах^{12, 13} преимущественно путем туннелирования, но поскольку такое туннелирование требует резонанса между энергетическими уровнями потенциальных ям в исходном и конечном состояниях, то ему «помогают» процессы возбуждения (испускания или поглощения) фононов, — имеет место фононно-стимулированное туннелирование (ФСТ) (phonon-assisted tunneling).

Наличие переходов между КРП обеспечивает появление в выражении для теплоемкости:

$$C_v = C_1 T + C_3 T^3 + C_E f_E \left(\frac{\theta_E}{T} \right) \quad (1)$$

наряду со вторым — дебаевским, и третьим — эйнштейновским, членами линейного слагаемого $C_1 \cdot T$, где величина $C_1 = \frac{\pi^2}{6} \cdot K_B^2 \cdot n$ (0) связана с энергетической плотностью КРП $n(E)$ при $E \rightarrow 0$ (K_B — константа Больцмана).

Анализ литературных данных о низкотемпературной теплоемкости биополимеров¹⁵ показал, что зависимость $C_v(T)$ описывается формулой (1), причем линейный член C_1 , а следовательно, и энергетическая плотность КРП в глобуле существенно выше, чем для неорганических и полимерных стекол¹⁶.

Таким образом, аналогия с КРП в аморфных телах позволяет детализировать понятие о КВКС биополимеров и переходах между ними. Если использование метода РДА привело к отказу от представлений о геометрической однозначности основного состояния молекул биополимеров (то есть изменению их характеристики от + — + к + — —), то анализ данных о низкотемпературной теплоемкости биополимеров позволил заключить, что переходы между КВКС происходят не только поверх разделяющих их активационных энергетических барьеров, но и туннельным образом, по механизму ФСТ, что роднит биополимеры со стеклами не только по структурным, но и динамическим характеристикам¹⁶.

Вместе с тем, такой вывод существенно расширяет представления о важнейшей роли туннелирования атомов и атомных групп в различных превращениях вещества¹⁷.

На атомном уровне каждому КВКС соответствует пребывание каждого атома макромолекулы в одном из присущих ему вырожденных или близких по энергии КРП. ФСТ наименьших атомных групп типа CH_2 , NH и т. п. между КРП приводит к появлению линейного члена в низкотемпературной теплоемкости.

Таким образом, основываясь на данных РДА и теплоемкости, можно рассматривать нативные белковые макромолекулы или макромолекулы ДНК как своеобразное гетерогенное стекло — совокупность областей с разными температурами стеклования, как выше, так и ниже комнатной. Подобная аналогия предполагает вырожденное соответствие между первичной структурой и пространственным строением биополимеров. Опыты по РРМИ позволяют сделать вывод о том, что основным параметром, определяющим плотность КРП в белке, является его гидратация. Так, с увеличением степени гидратации при комнатной температуре резко увеличивается число КРП¹⁸. Анализ переходов групп атомов между КРП на основе данных РРМИ¹⁸ показывает, что туннелирование может, по всей видимости, преобладать над активационными переходами между КРП вплоть до комнатной температуры. Наряду с изучением динамики биополимеров с помощью РДА, ГРС и РРМИ представляется большой интерес расширение круга экспериментов по измерению теплоемкости биополимеров в интервале температур от самых низких до комнатных. Поскольку анализ вероятности ФСТ позволяет получить характеристики активационных барьеров в превращениях биополимеров, то исследование их низкотемпературных свойств дают дополнительную информацию для описания функциональных свойств в физиологических условиях. В этой связи показательно, что в настоящее время в США готовится конференция по проблеме: «Низкотемпературные исследования и функции биомолекул при комнатной температуре».

Доклад полностью опубликован в 11, 16, 18.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шрёдингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физики? — М.: ИЛ, 1947. — С. 146.
2. Lindnerström - Lang K. — Chem. Soc. (London) Spec. Publ., 1955, v. 2, p. 1.

3. Koshland D., Neet K. E.— *Ann. Rev. Biochem.*, 1969, v. 37, p. 359.
4. Равновесная динамика нативной структуры белка /Под ред. Э. А. Бурштейна.— Научный центр биологических исследований. Пушкино, 1977.— С. 156.
5. Frauenfelder H., Petsko G. A., Tsernoglou D.— *Nature*, 1979, v. 280, p. 558.
6. Artymiuk P. J., Blake C. C. F., Grace D. E. P., Calley S. J., Phillips D. C., Sternberg H. J. E.— *Nature*, 1979, v. 280, p. 563.
7. Hartman H., Parak F., Steigemann W., Petsko G. A., Ponzzi D. R., Frauenfelder H.— *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 1982, v. 79, p. 4967.
8. Фролов Е. Н., Мокрушин А. Д., Лихтенштейн Г. И., Трухтанов В. А., Гольданский В. И.— *ДАН*, 1973, т. 212, с. 165.
9. Parak F., Frolov E. N., Mössbauer R. L., Goldanskii V. I.— *J. Mol. Biol.*, 1981, v. 145, p. 825.
10. Крупуанский Ю. Ф., Parak F., Goldanskii V. I., Mossbauer R. L., Gaubman E. E., Engelman H., Suzdalev I. P.— *Zs. Naturforsch.*, 1982, Bd. 37a, S. 57.
11. Гольданский В. И., Крупянский Ю. Ф., Фролов Е. Н.— *Мол. биол.*, 1983, т. 17, с. 532.
12. Anderson P. W., Halperin B. I., Varma C. M.— *Phil. Mag.*, 1972, v. 25, p. 1.
13. Phillips W. A.— *J. Low Temp. Phys.*, 1972, v. 7, p. 351.
14. Amorphous Solids. Low temperature properties.— *Topics in Current Physics*.— Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981, v. 24, p. 167.
15. Мревлишвили Г. М.— *УФН*, 1979, т. 128, с. 273.
16. Гольданский В. И., Крупянский Ю. Ф., Флеров В. Н.— *ДАН СССР*, 1983, т. 272, с. 978.
17. Goldanskii V. I.— *Nature*, 1979, v. 279, p. 409.
18. Goldanskii V. I., Крупуанский Ю. Ф.— *Proc. Intern. Conf. Appl. Moessb. Effect. Alma-Ata*, 1983.

537.611.42(048)

Б. А. Волков, А. А. Горбачевич, Ю. В. Копаев. Аномальные диамагнитные свойства систем со спонтанным током. Вопрос о существовании веществ, отличных от сверхпроводников и обладающих большими значениями диамагнитной восприимчивости, представляет значительный интерес. Диамагнитная реакция системы предполагает наличие в ней крупномасштабной токовой структуры, в соответствии с классическими представлениями о диамагнитной ларморовой прецессии контура с током в магнитном поле. Такая токовая структура должна обладать жесткостью для подавления парамагнитного эффекта изменения площади проекции токовых контуров на направление магнитного поля. Последний эффект и определяет парамагнитный знак магнитной восприимчивости обычных ферро- и антиферромагнетиков. С точки зрения точечной симметрии обычные магнетики описываются аксиальным вектором M , меняющим знак при обращении времени. Физический смысл вектора M в кристалле — локальная плотность намагниченности. Однако этим не исчерпывается возможная симметричная классификация веществ с токовой структурой. В последнее время привлекло внимание состояние, токовое упорядочение в котором характеризуется полярным вектором T , антисимметричным по отношению к инверсии времени¹⁻⁴. Этому состоянию отвечает упорядочение элементарных тороидных моментов^{5, 6}. Аналогичным образом в магнетиках и сегнетоэлектриках происходит упорядочение соответственно магнитных и электрических моментов, а точечная симметрия кристалла задается симметрией элементарного момента (в сегнетоэлектриках — это полярный вектор P , симметричный по отношению к обращению времени).

Электрические, магнитные и тороидные моменты порождают три независимых семейства электромагнитных мультиполей⁶. Описание системы с заданными распределениями электронной плотности $\rho(r)$ и плотности тока $j(r)$ во внешних электрических и магнитных полях является полным только при учете всех трех типов мультиполей. Простейший объект, обладающий только тороидным моментом, — соленоид с антифилярной обмоткой, свернутый в тор. Магнитное поле целиком сосредоточено внутри тора.

В выражении для плотности свободной энергии взаимодействие плотности тороидного момента с магнитным полем описывается членом^{3, 6}

$$\delta F_{\text{int } 1} = -\gamma \operatorname{rot} \mathbf{V} \cdot \mathbf{T} = -\gamma \mathbf{J} \mathbf{T};$$

здесь γ — коэффициент, определяемый параметрами микромодеи, \mathbf{J} — полный ток, \mathbf{V} — магнитная индукция. Выше температуры перехода в тороидное состояние (T_C) роль поля, сопряженного параметру порядка, играет внешний ток $\mathbf{J}_{\text{ext}} = \operatorname{rot} \mathbf{H}$ (\mathbf{H} — напряженность магнитного поля). В скрещенных электрическом и магнитном полях в плотности свободной энергии появляется вклад вида

$$\delta F_{\text{int } 2} = \lambda [\mathbf{E} \mathbf{V}] \mathbf{T},$$

что допускает существование магнитоэлектрического эффекта. Вектор \mathbf{T} при этом дуален антисимметричной компоненте магнитоэлектрического тензора. Таким образом вещества, в которых существует вектор \mathbf{T} , относятся к подмножеству совокупности классов, допускающих магнитоэлектрический эффект.

Имеется 31 класс магнитной симметрии, в которых разрешено существование вектора \mathbf{T} ^{5, 7}.

К настоящему времени вопрос реализации ТС подробно изучен в рамках только одной микроскопической модели — модели экситонного диэлектрика⁸. Краткое резюме исследований о возможности реализации ТС⁹ сводится к следующему:

1. Подходящими объектами для поисков ТС являются системы с сильными межэлектронными корреляциями. Например, узкощелевые полупроводники и соединения полуметаллического типа с совпадающими в импульсном пространстве экстремумами электронной и дырочной зон¹⁰.

2. Наиболее вероятным является образование ТС на фоне сегнетоэлектрического или антиферромагнитного состояний.

3. Условия для реализации ТС облегчаются в окрестности макроскопических неоднородностей (доменных стенок, межзеренных границ, дислокаций, примесных кластеров и т. д.).

4. Появлению ТС способствует введение в систему примесей — заряженных в случае сегнетоэлектриков и заряженных и магнитных в случае антиферромагнетиков.

5. Сильное спин-орбитальное взаимодействие также благоприятствует проявлению эффектов, связанных с тороидным упорядочением.

Необычны магнитные свойства ТС. Магнитная восприимчивость в окрестности перехода в ТС выше температуры перехода, парамагнитна и отлична от нуля только в случае неоднородного магнитного поля¹¹. Наиболее интересное свойство ТС — возможность аномально большой диамагнитной восприимчивости (сверхдиамагнетизма). Структура ТС в магнитном поле ниже температуры перехода определяется из уравнения равновесия

$$\nabla U = -\mathbf{f}_{\text{ext}}; \quad (4)$$

здесь U — величина, связанная с плотностью свободной энергии преобразованием Лежандра. При заданных граничных условиях U имеет смысл плотности энергии Гиббса. В правой части (4) стоит сила Лоренца $[\mathbf{J}\mathbf{B}]$. Выражение для макроскопической плотности тока в ТС имеет вид

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \gamma \text{rot rot } \mathbf{T}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

т. е. плотность спонтанного тока отлична от нуля в случае поперечно-неоднородного вектора $\mathbf{T}(\mathbf{r})$. В работе⁴ на основе (1) и (2) получено выражение для диамагнитного отклика ТС на однородное магнитное поле

$$\chi = \chi_L \left(\frac{\lambda_J}{r_a} \right)^2,$$

где χ_L — диамагнитная восприимчивость Ландау невзаимодействующего электронного газа, λ_J — новый характерный масштаб теории (эффективный радиус токовых корреляций), r_a — длина порядка межатомной. Так как λ_J может быть и порядка r_a , то для идентификации ТС следует учитывать всю совокупность электромагнитных свойств ТС, например: магнитоэлектрический и фотогальванический эффекты в ТС, а также аномалии тензора электропроводности вблизи температуры перехода в ТС¹².

ЛИТЕРАТУРА

1. Волков Б. А., Копаев Ю. В. — Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 10.
2. Волков Б. А., Копаев Ю. В., Нунупаров М. С., Тугушев В. В. — Ibid., 1979, т. 30, с. 317.
3. Волков Б. А., Горбацевич А. А., Копаев Ю. В., Тугушев В. В. — ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 729.
4. Волков Б. А., Горбацевич А. А., Копаев Ю. В. — ЖЭТФ, 1984, т. 86, с. 1870.
5. Ginzburg V. L., Gorbatsevich A. A., Kopaev Yu. V., Volkov B. A. — Sol. State Comm., 1984, v. 50, p. 339.
6. Дубовик В. М., Гусунян Л. А. — Физ. ЭЧАЯ, 1983, т. 14, с. 1193.
7. Ascher E. — Helv. Phys. Acta, 1966, v. 39, p. 40.
8. Кеддыш Л. В., Копаев Ю. В. — ФТТ, 1964, т. 6, с. 2791.
9. Halperin B. I., Rice T. M. — Sol. State Phys., 1968, v. 21, p. 115.
10. Волков Б. А., Канцер В. Г., Копаев Ю. В. — ЖЭТФ, 1978, т. 75, с. 1402. Горбацевич А. А., Тугушев В. В. — ЖЭТФ, 1979, т. 77, с. 2104. Волков Б. А., Копаев Ю. В., Нунупаров М. С. — ФТТ, 1979, т. 21, с. 2733.
11. Копаев Ю. В., Нунупаров М. С. — ФТТ, 1980, т. 22, с. 3599.
12. Копаев Ю. В., Цидильковский И. М. — Вестн. АН СССР, 1983, № 8, с. 49.

11. Волков Б. А., Горбачевич А. А., Копаев Ю. В., Тугушев В. В. — ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 1904.
12. Горбачевич А. А., Копаев Ю. В., Тугушев В. В. — ЖЭТФ, 1983, т. 85, с. 1107.

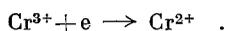
537.63(048)

В. Г. Веселаго. Фотомagnetизм. Фотомagnetизм является сравнительно новым направлением, которое изучает зависимости макроскопических магнитных характеристик сильных магнетиков от освещения. Сейчас известны многие магнитоупорядоченные вещества, у которых магнитная проницаемость, коэрцитивная сила, магнитная анизотропия и другие свойства существенно зависят от освещения. Большинство таких веществ, хотя и не все, являются магнитными полупроводниками, в которых имеются две взаимодействующие системы — подвижные, коллективизированные носители тока, отвечающие за проводимость, и локализованные электронные спины, отвечающие за магнитное упорядочение. Взаимодействие этих двух подсистем приводит, в частности, к появлению фотомagnetизма. Следует отметить, что конкретный микроскопический механизм фотомagnetных явлений может быть самым различным. Можно указать, однако, две наиболее часто встречающиеся модели фотомagnetных явлений — $s-d$ -модель и центровая модель.

Развитие $s-d$ -модели фотомagnetизма началось с работ ^{1, 2}, в которых было указано, что при фотовозбуждении носителей тока в магнитных полупроводниках возможно изменение температуры фазового перехода за счет $s-d$ -взаимодействия между фотовозбужденными носителями тока и системой локализованных спинов. Однако оценка, сделанная в работе ³, показала, что требуется очень большое — $\sim \Delta n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ — изменение концентрации носителей для достижения сколько-нибудь заметного изменения T_c . В настоящее время существует только один цикл работ ^{4, 5}, в котором экспериментально доказывается существование сдвига точки Кюри при освещении на величину порядка 0,1 К в магнитном полупроводнике EuS . В цикле работ ^{6, 7} была впервые учтена энергия $s-d$ -обмена при определении равновесной доменной структуры, и экспериментально показано изменение этой структуры за счет изменения $s-d$ -обмена при освещении.

Гораздо более разнообразны фотомagnetные явления, объясняющиеся с помощью центровой модели, которая сейчас разработана уже на полуквантовом уровне. Именно эта модель ответственна за фотомagnetные явления в магнитных полупроводниках типа CdCr_2Se_4 ^{8, 9} и в железно-иттриевом гранате (ЖИГ) ^{10, 11}. Фотомagnetизм этих веществ сейчас, наверное, наиболее изучен и объясняется образованием под действием света анизотропных центров (Cr^{2+} в CdCr_2Se_4 и Fe^{2+} в ЖИГ), появление которых существенно уменьшает подвижность доменных стенок. Это проявляется в уменьшении под действием света магнитной проницаемости ⁹, увеличении коэрцитивной силы ¹², существенном изменении характера скачков Баркгаузена ¹³. Спектральные и временные характеристики фотомagnetных явлений в CdCr_2Se_4 и родственных ему соединениях существенно зависят от их энергетического спектра. Детали этого спектра сейчас во многом еще не ясны, и фотомagnetизм, являясь, по сути дела, сугубо спектральным методом, уже внес несомненный вклад в расшифровку энергетического спектра магнитных полупроводников типа CdCr_2Se_4 .

Образование анизотропных ионов Cr^{2+} в CdCr_2Se_4 происходит путем переноса фотоэлектрона из валентной зоны на трехвалентный ион хрома



Таким образом, в данном случае мы имеем дело с центральной моделью, в которой происходит изменение валентности иона, образующего анизотропный центр. Однако известны фотомagnetные явления, которые объясняются в рамках центральной модели без изменения валентности. Так, в работе ¹⁴ наблюдалось изменение магнитной структуры EuCrO_3 за счет оптической накачки иона Eu^{3+} , при которой происходит изменение его магнитного состояния.

Необычные недавние результаты экспериментов с FeVO_3 ¹⁵, в которых освещение образца приводило к движению полосовой доменной структуры. Соединение FeVO_3 является диэлектриком, и фотомagnetизм в нем безусловно объясняется на основе центральной модели. При этом свет создает в образце FeVO_3 анизотропию, ось которой направлена перпендикулярно магнитному моменту. Это приводит к созданию вращательного момента в спиновой системе и возникновению волнового движения в доменной структуре. Такой процесс является, по-видимому, одной из разновидностей автоволновых процессов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Карпенко Б. В., Бердышев А. А. — ФТТ, 1963, т. 5, с. 3397.
2. Бердышев А. А. — ФТТ, 1966, т. 8, с. 1382.
3. Лидоренко Н. С., Матвеев В. М., Нагаев Э. Л. — ДАН СССР, 1976, т. 230, с. 1085.
4. Афанасьев М. М., Компан М. Е., Меркулов И. А. — Письма ЖЭТФ, 1976, т. 23, с. 621.

5. Афанасьев М. М., Компан М. Е., Меркулов И. А.— Письма ЖТФ, 1976, т. 2, с. 982.
6. Генкин Г. М., Ноздрин Ю. Н., Токман И. Д., Шасти́н В. Н.— Письма ЖЭТФ, 1982, т. 35, с. 162.
7. Генкин Г. М., Ноздрин Ю. Н., Разенштайн П. С., Шасти́н В. Н.— ФТТ, 1983, т. 25, с. 3706.
8. Lems W., Rijniere P. I., Bongers P. F., Enz U.— Phys. Rev. Lett., 1968, v. 21, p. 1643.
9. Веселаго В. Г., Вигелева Е. С., Виноградова Г. И., Калинин В. Т., Махоткин В. Е.— Письма ЖЭТФ, 1972, т. 15, с. 316.
10. Dillon J. F., Giorgy E. M., Reméina J. P.— Phys. Rev. Lett., 1969, v. 22, p. 643.
11. Коваленко В. Ф., Куц П. С., Колежук Е. С.— ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 1399.
12. Анзина Л. В., Веселаго В. Г., Рудов С. Г.— Письма ЖЭТФ, 1975, т. 23, с. 520.
13. Веселаго В. Г., Кузнецов В. Н., Махоткин В. Е.— Изв. АН СССР. Сер физ., 1981, т. 45, с. 1646.
14. Головенчиц Е. И., Санина В. А., Шаплыгина Т. А.— ЖЭТФ, 1981, т. 80, с. 1911.
15. Федоров Ю. М., Лексиков А. А., Аксенов А. Е.— Письма ЖЭТФ, 1983, т. 37, с. 134.