

*А. А. ВЛАСОВ*

---

*НЕЛОКАЛЬНАЯ  
СТАТИСТИЧЕСКАЯ  
МЕХАНИКА*



А. А. ВЛАСОВ

---

**НЕЛОКАЛЬНАЯ  
СТАТИСТИЧЕСКАЯ  
МЕХАНИКА**



«НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
МОСКВА 1978



**В 57**  
**УДК 539.1**

**Нелокальная статистическая механика.** А. А. В л а с о в, монография, Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1978.]

Монография посвящена развитию нового подхода к статистической теории и некоторым конкретным результатам, полученным в его рамках. В основу подхода кладется описание системы многих тел с помощью функций распределения, зависящих от координат, скоростей, ускорений, первых производных от ускорений и т. п. На единой основе описываются нитевидные и пластинчатые структуры как возбужденные состояния кристалла, явление кавалирования, эффекты теней и пятен Венера. Последняя глава монографии посвящена построению ковариантных статистических уравнений и некоторым методам их решения.

Табл. 6, рис. 20, библи. назв. 42.

*Анатолий Александрович Власов*

## НЕЛОКАЛЬНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

М., 1978 г., 264 стр. с илл.

Редактор В. К. Федянин

Техн. редактор Н. В. Кошелева

Корректоры О. А. Бутусова, Л. Н. Боровина

ИБ № 2459

Сдано в набор 28.10.77.

Подписано к печати 24.01.78. Т-01303.

Бумага 60×90<sup>1/8</sup>, тип. № 1. Обыкновенная гарнитура.

Высокая печать. Условн. печ. л. 16,5.

Уч.-изд. л. 16,98. Тираж 4000 экз. Заказ № 299

Цена книги 2 руб.

Издательство «Наука»

Главная редакция физико-математической литературы

117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

2-я типография издательства «Наука».

Москва, Г-99, Шубинский пер., 10.

В  $\frac{20402-039}{053(02)-78}$  107-78

© Главная редакция  
физико-математической литературы  
издательства «Наука», 1978

Монография А. А. Власова содержит изложение развитого им нового подхода к системе многих частиц и некоторые конкретные результаты его применения (в основном к явлениям в кристаллах).

При рецензировании было сделано довольно много серьезных замечаний принципиального характера, касающихся и самой не-локальной статистической теории, и, в особенности, конкретных выводов, к которым она приводит. С рядом замечаний А. А. Власов был согласен, однако ему не удалось учесть их при подготовке рукописи к печати. К сожалению, вся основная работа по подготовке рукописи к изданию была проведена после кончины А. А. Власова, и в рукопись были внесены лишь исправления чисто стилистического характера, часть которых были отмечены рецензентами. Поскольку большинство замечаний по материалу рукописи могло быть учтено лишь в процессе авторской ее переработки, редакция сочла возможным издать монографию А. А. Власова практически в первоначальном ее варианте.

Анатолий Александрович Власов внес весьма существенный вклад в современную теоретическую физику. Для научного творчества А. А. Власова всегда было характерно обращение к фундаментальным и актуальным проблемам, создание оригинальных методов их решения. Многие результаты работ А. А. Власова навсегда вошли в физику. Особо стоит отметить исследования А. А. Власова в области статистической механики, которые активно велись им долгие годы вплоть до последних дней его жизни.

Уравнение Власова является фундаментом теории плазмы; в работах А. А. Власова впервые возникла столь интенсивно используемая ныне концепция коллективных переменных. Нам представляется весьма существенным, что уравнение Власова имеет микроскопические решения, соответствующие точным решениям уравнений классической механики. Эти результаты А. А. Власова получили признание и широко используются не только в Советском Союзе, но и за рубежом.

Данная монография подытоживает многолетние исследования А. А. Власова по созданию весьма нетрадиционного подхода к описанию свойств системы многих тел. Излагается и сам метод, и ряд конкретных результатов его применения. Несмотря на то, что многое здесь представляется дискуссионным, мы полагаем, что вдумчивый читатель, несомненно, извлечет то ценное, что содержится в монографии А. А. Власова.

Стоит подчеркнуть, что работы А. А. Власова никогда не оседали мертвым грузом на библиотечных полках, приводили к оживленным дискуссиям, оказывали большое влияние на развитие статистической физики.

Мне представляется, что и данная монография послужит стимулом для дальнейших исследований.

Академик *Н. Н. Боголюбов*

# ОСНОВЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ БЕЗ ПРЕДПОЛОЖЕНИЙ ОБ ИХ ЛОКАЛИЗАЦИИ И ЦЕЛОЧИСЛЕННОСТИ

---

**§ 1. Функции распределения, зависящие от координат, скоростей и ускорений, как первичные понятия теории**

В уравнениях, описывающих систему взаимодействующих частиц в рамках классической механики, статистической механики и квантовой механики:

$$m_k \ddot{\mathbf{r}}_k = -\nabla_{\mathbf{r}_k} \sum_{l=1}^N K(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|), \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} D(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N, t) = \\ = \left[ \left( \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N K(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|) \right) \right] D, \quad (I.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \\ = \left[ \sum_{k=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_k}^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N K(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|) \right] \psi, \end{aligned}$$

число частиц  $N$  — целое.

В макроскопических случаях возможность счета обеспечивается локализацией частиц как в отношении их положений, так и скоростей. В статистическом уравнении Лиувилля — Гиббса нет предположения о локализации частиц, но предположение о том, что  $N$  — целое, сохраняется.

Однако совокупность этих двух предположений не является последовательной и приводит к непреодолимым топологическим трудностям [11].

В квантовом случае целочисленность заряда ядра строго определяет число электронов в атомах. Однако в других случаях экспериментальные методы исследования приносят информацию только о вероятном значении числа частиц. Например, даже в наиболее совершенных атомных структурах — кристаллах опыт дает возможность установить только целочисленность элементарных ячеек, данные о местоположении атомов в узлах решетки гаранти-

руют лишь вероятное значение этого числа, которое может быть и не целым.

В реальных ситуациях счет частиц связан с физическими условиями реализации счета и наличием его влияния на состояние системы частиц. Поэтому свойства целочисленности, частичной или полной локализации должны выводиться из статистической теории, а не постулироваться с самого начала только при известных физических ограничениях, исключающих статистические выбросы частиц из системы.

Будем описывать частицу некоторым центром (тяжести), положением этого центра и его кинематическими характеристиками движения — скоростями и ускорениями, включая ускорения высших порядков.

Частица, таким образом, будет характеризоваться нелокальным образом, т. е. всем спектром своих геометрических и кинематических свойств:  $-\infty < r, v, \dot{v}, \ddot{v}, \dots < \infty$ , для каждого момента времени  $t$ . Независимость указанных величин вытекает из независимости дифференциалов  $dx^\alpha, d^2x^\alpha, d^3x^\alpha, \dots$ , которые можно себе представить в виде бесконечно малых отрезков, опирающихся на

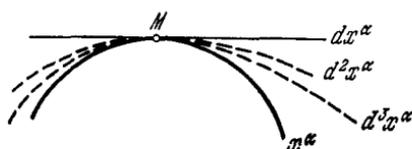


Рис. 1.

точку  $M$ . Эта точка находится на некоторой гиперповерхности, изображающей многообразие значений координат  $x^\alpha$ , где  $\alpha = 1, 2, 3$ , и через нее можно провести несколько касательных поверхностей с разным порядком касания к исходной гиперповерхности (рис. 1).

Дифференциалы  $dx^\alpha, d^2x^\alpha, d^3x^\alpha, \dots$  располагаются на различных касательных поверхностях и поэтому являются независимыми отрезками как по величине, так и по направлению.

Точка и совокупность дифференциалов разных порядков в окрестности этой точки определяют специфическое пространство, которое для целей математики ввел Картан, — так называемое пространство опорных элементов [2].

При наличии часов и возможности параметризовать смещение, относим их к моменту времени  $t$ :

$$v^\alpha = \frac{dx^\alpha}{dt}, \quad \dot{v}^\alpha = \frac{d^2x^\alpha}{dt^2}, \quad \ddot{v}^\alpha = \frac{d^3x^\alpha}{dt^3}, \dots,$$

мы переходим к пространству геометрических и кинематических свойств частиц, которое становится зависимым от факта существования самих частиц и наличия у них движений.

Примем в качестве исходного постулата, что физические условия, как внешние, так и внутренние, могут изменять состояние системы частиц только через сами функции распределения, но

не через аргументы этих функций. Последние являются «полем возможностей».

Функции распределения, содержащие возрастающую информацию о кинематических свойствах частиц, выражаются последовательностью

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \\ & f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \\ & f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\dot{\mathbf{v}}, \\ & f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\dot{\mathbf{v}} d\ddot{\mathbf{v}}, \\ & \dots \end{aligned} \quad (I.2)$$

Члены последовательности связаны между собой теоремой сложения теории вероятности:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \\ f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) &= \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\dot{\mathbf{v}}, \\ f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) &= \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, t) d\ddot{\mathbf{v}}, \\ f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, t) &= \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, \ddot{\ddot{\mathbf{v}}}, t) d\ddot{\ddot{\mathbf{v}}}, \\ & \dots \end{aligned} \quad (I.3)$$

Таким образом, первичным понятием теории являются функции распределения, а не понятия, постулирующие локализацию и целочисленность частиц, вакуум, а также последующие понятия: траектории, уравнения движения, взаимодействия. По указанной причине функции распределения не предполагают усреднения по времени, пространству или начальным условиям.

Число частиц в системе выражается с помощью функции распределения и, следовательно, также имеет вероятностное значение, т. е. не обязано быть только целым числом:

$$\int_V \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\dot{\mathbf{v}} \neq N, \quad N - \text{целое.} \quad (I.4)$$

Предположим теперь, что функции распределения подчиняются законам сохранения. Идя тем же путем, как и при выводе уравнения непрерывности, выражающего сохранение массы и заряда, придем к следующей цепочке законов сохранения, связывающих вероятное значение плотностей частиц со средним значением

потоков этих частиц [11]:

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r \int_{(\infty)} v f(r, v, t) dv = 0,$$

$$\frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r v f + \operatorname{div}_v \int_{(\infty)} \dot{v} f(r, v, \dot{v}, t) d\dot{v} = 0,$$

(I.5)

$$\frac{\partial f(r, v, \dot{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r v f + \operatorname{div}_v \dot{v} f + \operatorname{div}_{\ddot{v}} \int_{(\infty)} \ddot{v} f(r, v, \dot{v}, \ddot{v}, t) d\ddot{v} = 0,$$

.....

Дифференциальная форма законов сохранения определяет эволюцию функций распределения и зависимость этих функций от геометрических и кинематических характеристик частиц. Каждая строка при этом содержит две неизвестные функции, и поэтому законы сохранения не дают еще замкнутого аппарата для решения задачи. Необходимо к законам сохранения добавить информацию, обусловленную учетом взаимодействия между частицами.

**§ 2. Взаимодействия как связь (ограничение) вероятных значений кинематических и геометрических величин, характеризующих частицы**

Рассмотрим интеграл во второй строке (I.5)  $\int_{(\infty)} \dot{v} f(r, v, \dot{v}, t) d\dot{v}$ . Он

выражает среднее значение ускорения частиц, причем усреднение произведено специальное — по статистическому разбросу ускорений. Если наблюдаемые ускорения частиц — средние в указанном смысле, то, если воспользоваться результатами классической теории, открывается путь связи кинематических средних с полем силовых взаимодействий.

При переносе этой связи из классической теории нужно отделить те ее черты, которые необходимо использовать для общепринятого подхода предположений локализации и целочисленности частиц. Этого мы достигнем, выражая силовые понятия также через функции распределения:

$$\frac{\int_{(\infty)} \dot{v} f(r, v, \dot{v}, t) d\dot{v}}{\int_{(\infty)} f(r, v, \dot{v}, t) d\dot{v}} = \langle \dot{v} \rangle = - \frac{1}{m} \operatorname{grad}_r U(r, t), \quad (I.6)$$

где потенциальная функция должна включать коллективные взаимодействия между элементами статистического континуума без

введения указанных ограничений:

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{r}', \mathbf{v}', t) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}'.$$

Ядро интегральной связи не будет определяться теорией и должно быть конкретизировано посредством апелляции к опыту или к другой теории.

В этом случае вторая строка в законах сохранения (I.5) приводит к замкнутому уравнению самосогласованного вида [3, 4]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r \mathbf{v} f + \operatorname{div}_v \left( -\frac{1}{m} \operatorname{grad}_r U \right) f = 0, \quad (\text{I.7})$$

где  $U(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  определено выше. Оно дает возможность, зная ядро  $K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{r}', \mathbf{v}', t)$ , определять функцию распределения.

В простейшем случае взаимодействий в виде парного центрального закона сил

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{r}', \mathbf{v}', t) = K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (\text{I.8})$$

если воспользоваться тождествами

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_r \mathbf{v} f &\equiv \mathbf{v} \operatorname{grad}_r f + f \operatorname{div}_r \mathbf{v}, \\ \operatorname{div}_r \mathbf{v} &\equiv 0, \\ \operatorname{div}_v \operatorname{grad}_r U(\mathbf{r}, t) &\equiv 0, \end{aligned} \quad (\text{I.9})$$

которые основываются на независимости переменных  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{v}$ , исходное уравнение можно переписать так:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f - \frac{1}{m} \nabla_r U(\mathbf{r}, t) \nabla_v f = 0, \quad (\text{I.10})$$

где

$$U(\mathbf{r}, t) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}.$$

При учете многочастичных взаимодействий (например, трехчастичных) выражение для  $U(\mathbf{r}, t)$  становится нелинейным:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}, t) &= \int K_{12}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v} + \\ &+ \iint K_{123}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r} - \mathbf{r}''|, |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) \times \\ &\quad \times f(\mathbf{r}'', \mathbf{v}'', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{v}''. \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

Стандартные молекулярные потенциалы типа Морзе и Ленарда — Джонса даются формулами

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \begin{cases} \sum_{s \geq 1} \frac{G_s}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^s} e^{-\alpha_s |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} (-1)^s, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < r_1, \\ \sum_{s \geq 6} \frac{F_s}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^s} - \frac{F_6}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^6}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > r_2, \end{cases} \quad (\text{I.12})$$

где коэффициенты  $G_s, \kappa_s, F_s, F_0$ , а также расстояния между частицами  $r_1$  и  $r_2$  являются характерными параметрами взаимодействий, зависящими от природы атомов. Для аргона и гелия, например,

$$K(r) = \beta u \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^n - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (I.13)$$

где для аргона  $n = 12$ ,  $u \approx 1,6 \cdot 10^{-14}$  эрг,  $\beta = 4$ ,  $r_0 = 3,1$  Å, для гелия  $n = 8$ ,  $u \approx 6,99 \cdot 10^{-16}$  эрг,  $\beta = 9,48$ ,  $r_0 = 2,6$  Å. При учете взаимодействий на более близких, чем это неявно предполагается в потенциалах Ленарда — Джонса, расстояниях между атомами, ядра взаимодействий  $K$  могут сами зависеть как от скоростей, так и от функции распределения:

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|, \{f\}). \quad (I.14)$$

Например, в явлениях сближения частиц, при не особенно больших энергиях сближения, играет роль «радиус непроницаемости» отталкивательных сил, зависящий от кинетической энергии сближения:

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|, \{f\}) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > r_0, \\ \infty, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leq r_0, \end{cases} \quad (I.15)$$

при этом  $r_0$  определяется требованием

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0} e^{-\kappa r_0} = \frac{mv_{кр}^2}{2}, \quad (I.16)$$

где критическое значение скорости  $v_{кр}$  находится из условия на функцию распределения

$$f_{|\mathbf{v}| > v_{кр}} = 0. \quad (I.17)$$

В выражении (I.15) экранированного потенциала величина  $\kappa$  определяется теорией Томаса — Ферми

$$\kappa^{-1} = a_B \cdot 0,8853 (Z_1^{3/2} + Z_2^{3/2})^{-1/2},$$

где  $a_B$  — боровский радиус,  $Z_1$  и  $Z_2$  — порядковые номера атомов. В предыдущих случаях ядро  $K$  выражало короткодействующие силы, которые можно охарактеризовать требованием

$$\int_{(\infty)}^{\infty} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = 4\pi \int_0^{\infty} K(s) s^2 ds < \infty. \quad (I.18)$$

Кулоновские и гравитационные силы не удовлетворяют этому условию, поэтому их введение нужно рассмотреть особо.

В электростатическом случае взаимодействий суммарный потенциал в системе частиц можно выразить через вероятную плотность заряда с помощью уравнения Пуассона, и тогда основное уравнение принимает вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r \mathbf{v}f + \operatorname{div}_v \left( -\frac{e}{m} \operatorname{grad}_r \varphi \right) f = 0, \quad (\text{I.19})$$

$$\text{где } \Delta \varphi = -4\pi e \int_{(\infty)} f dv.$$

Для гравитирующих частиц

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r \mathbf{v}f + \operatorname{div}_v \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle f = 0, \quad (\text{I.20})$$

где

$$\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle = -\operatorname{grad}_r U, \quad \Delta U = 4\pi Gm \int_{(\infty)} f dv.$$

Для случая электродинамически взаимодействующих частиц аналогично

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r \mathbf{v}f + \operatorname{div}_v \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle f = 0, \quad (\text{I.24})$$

$$\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle = \frac{\int_{(\infty)} \dot{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\dot{\mathbf{v}}}{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)} = \frac{e}{m} \left( \mathbf{e} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{h}] \right),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{h} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} e \int_{(\infty)} \mathbf{v}f dv, \quad \operatorname{div} \mathbf{e} = 4\pi e \int_{(\infty)} f dv$$

$$\left( \operatorname{rot} \mathbf{e} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{h} = 0 \right).$$

В приведенных основных уравнениях электромагнитное поле возбуждается источниками статистической природы — плотностью вероятности местоположения центра тяжести заряженных частиц и вероятным значением плотности тока — и не зависит от пространственной структуры самих частиц.

В этом пункте заключается принципиальное отличие от классической электродинамики, в которой напряженности электромагнитных полей возбуждаются не зарядом как индивидуальной величиной, а распределением заряда внутри объема заряженных частиц. Частицы, имеющие различные распределения плотности



Рис. 2.

заряда внутри своего объема или на поверхности, но имеющие один и тот же заряд  $e$  в целом (рис. 2), создают в нелокально-статистической теории одно и то же электромагнитное поле.

Наиболее важными новыми свойствами нелокально-статистических уравнений являются следующие:

1. Независимость их структуры от общего числа частиц в системе, так как число частиц не входит в операторы уравнения, а определяет только нормировку решений.

Это свойство позволяет получить решения, малочувствительные или совсем нечувствительные к общему числу частиц, чего нельзя добиться в классической задаче многих тел.

Например, удается найти точные решения исходных уравнений, являющиеся правомерными для любого числа частиц в системе. В классической проблеме уже трех тел до сих пор не получено точных решений, которыми можно было бы пользоваться. В этом отличии от классических уравнений состоит наибольшее преимущество излагаемой теории.

2. Общность возбуждения силовых полей, независимо от их природы. Молекулярное поле определяется (возбуждается) не точными, а только вероятными местоположениями атомов, что выражается потенциальной функцией

$$U(\mathbf{r}) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}, \quad (I.22)$$

содержащей плотность вероятности частиц в коллективе. Это аналогично возбуждению электростатических или гравитационных полей

$$\Delta\phi = -4\pi e \int_{(\infty)} f d\mathbf{v}, \quad \Delta U = 4\pi Gm \int_{(\infty)} f d\mathbf{v}. \quad (I.23)$$

Характерен единый статистический механизм возбуждения полей разной природы.

3. В связи с указанной общностью и в отличие от механической задачи многих тел, исходные уравнения содержат член «самовоздействия», так как производится интегрирование по всем точкам пространства, включающим области местоположения интересующей частицы. Это приводит к заключению, что эффекты «самовоздействия» должны иметь проявление и для молекулярных и гравитационных сил.

### § 3. Случаи точных решений нелокально-статистических уравнений

1. Пространственно-однородное распределение вероятностей местоположения частиц как точное решение в случае короткодействующих сил и одного сорта частиц.

К исходному уравнению (I.10) добавим дополнительные условия стационарности

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (I.24)$$

и пространственной однородности

$$\frac{\partial f}{\partial x_\lambda} = 0, \quad \lambda = 1, 2, 3. \quad (\text{I.25})$$

Тогда, если

$$\rho \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = \text{const} < \infty \quad (\rho = \int_{(\infty)} f d\mathbf{v}), \quad (\text{I.26})$$

то пространственно-однородное и стационарное распределение является точным решением в неограниченном пространстве. Условие (I.26) соблюдается для короткодействующих сил и не соблюдается для потенциалов  $\sim 1/s, 1/s^2$ . В условиях конечного объема полученное решение также остается справедливым, но только для точек, достаточно удаленных от границы в сравнении с эффективным радиусом действия потенциальной функции.

Пространственно-однородное и стационарное решение является вполне нелокальным, как в отношении времени, так и в отношении пространственных координат. И поэтому является характерным для теории.

Тот факт, что однородное распределение является точным решением в случае короткодействующих сил взаимодействия и наиболее простейшим из решений, находится в соответствии с наблюдаемым фактом, что наиболее часто встречающееся распределение плотности частиц в газах и жидкостях является пространственно-однородным и стационарным.

2. Решения, описывающие температурные распределения частиц. Введем гипотезу (оправдывающуюся последующим вычислением), что требованием, выделяющим температурные решения, является статистическая независимость распределения скоростей от распределения частиц по пространственным координатам.

Это требование отличается от способов введения температуры путем термостата или путем «столкновительных» механизмов, основывающихся на локальных представлениях.

Добавим к исходному уравнению (I.10) условия стационарности (I.24) и максимально возможной статистической независимости

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r}) w(v_x^2) w(v_y^2) w(v_z^2). \quad (\text{I.27})$$

Подстановка (I.27) в уравнение (I.10) дает

$$\sum_{\alpha=1}^3 v_\alpha \left[ \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} w(v_\alpha^2) - \frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_\alpha} \frac{\partial w(v_\alpha^2)}{\partial v_\alpha} \right] \prod_{\beta, \gamma \neq \alpha} w(v_\beta^2) w(v_\gamma^2) = 0. \quad (\text{I.28})$$

Ввиду независимости компонент скорости друг от друга обеспечивается разделение переменных в уравнении (I.28):

$$\frac{\partial \rho / \partial x_\alpha}{\partial U / \partial x_\alpha} = \frac{\partial w(v_\alpha^2) / \partial v_\alpha}{m v_\alpha (v_\alpha^2)} = -\frac{1}{\theta} = \text{const} \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (\text{I.29})$$

что дает

$$\rho(\mathbf{r}) = C e^{-U(\mathbf{r})/\theta}, \quad w(v_\alpha^2) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right) e^{-mv_\alpha^2/2\theta}. \quad (\text{I.30})$$

Появившаяся постоянная разделения играет роль температуры, так как определяет величину дисперсии разброса скоростей.

Полученные температурные распределения являются точными решениями исходного уравнения, которые выделяются условиями стационарности и статистической независимости. Эти решения свободны от ограничений, накладываемых на локализацию и целочисленность в классических теориях. В соответствии с развиваемой теорией экспериментальные способы измерения температуры также не требуют ни локализации частиц, ни их счета.

Присоединяя к формулам температурного распределения поле коллективных взаимодействий между частицами (I.22), приходим к следующим нелинейным уравнениям, дающим возможность вычислять молекулярный потенциал и плотность местоположения частиц в условиях температурного равновесия:

$$U(\mathbf{r}) = C \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}', \quad (\text{I.34})$$

$$\rho(\mathbf{r}) = C \exp\left[-\frac{1}{\theta} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\right].$$

Полученные нелинейные уравнения лежат в основе новой нелокальной модели кристалла (см. главу II).

Во вращающихся системах взаимодействующих частиц возникает распределение Оорта, предложенное на основе анализа данных астрономических наблюдений для звездных образований [24].

Ставя задачу учесть вращение системы и условие статистической независимости, будем искать решение в виде

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(r, \vartheta, \varphi) w(v_r^2) w(v_\theta^2) w(v_\varphi^2) F(r, v_\varphi, \sin \vartheta), \quad (\text{I.32})$$

где функция  $F$  нарушает статистическую независимость между скоростью вдоль параллелей, радиусом и азимутальным углом.

Подстановка предполагаемого решения в исходное уравнение дает возможность получить функцию  $F$  в виде [11]

$$F = \exp\left[\sum_{\nu} a_{\nu} I^{\nu}\right], \quad I = rv_{\varphi} \sin \vartheta, \quad (\text{I.33})$$

где  $a_{\nu}$  — произвольные постоянные. Используя естественные условия на функцию  $F$  и ограничиваясь простейшим случаем

$$a_1 = \frac{m\omega}{\theta}, \quad a_2 = -A, \quad A > 0, \quad a_{m>2} = 0, \quad (\text{I.34})$$

где  $\omega$  — частота вращения,  $A$  — новая постоянная, выводим распределение Оорта:

$$f = C \exp\left[-\frac{U}{\theta} - \frac{m(v_r^2 + v_\theta^2)}{2\theta}\right] \exp\left[-\left(\frac{m}{2\theta} + \alpha\right)(v_\varphi - u_\varphi)^2 + S(r, \theta)\right],$$

где

$$\alpha = Ar^2 \sin^2 \theta, \quad u_\varphi = \frac{\omega r \sin \theta}{1 + \frac{2\theta}{m} Ar^2 \sin^2 \theta}, \quad (I.35)$$

$$S(r, \theta) = \frac{m}{2\theta} \frac{\omega^2 r^2 \sin^2 \theta}{1 + \frac{2\theta}{m} Ar^2 \sin^2 \theta}.$$

Оно приводит ко второй величине дисперсии скоростей вдоль параллелей (второй температуре):

$$\frac{m}{2\theta} \rightarrow \frac{m}{2\theta} + Ar^2 \sin^2 \theta,$$

зависящей от радиуса вращения и азимутального угла.

Распределение Оорта включает учет классического вращения  $\omega \neq 0$ ,  $A = 0$ . Однако обычное представление о классическом вращении связано с трудностями. При  $r \rightarrow \infty$  линейная скорость вращения и функция распределения частиц становятся бесконечно большими. Основная ценность распределения Оорта заключается в преодолении этого. Как показано выше, это связано с установлением общности температурного распределения и эффекта вращения. Отметим, что единообразный вывод температурного распределения и распределения Оорта встречается с непреодолимыми трудностями в «столкновительных» теориях. Из уравнения Больцмана вывести распределение Оорта невозможно [11].

3. Заметим наконец, что отказ от требований локализации частиц и их целочисленности имеет место уже в классических теориях сплошных сред (гидродинамике и теории упругости). Молекулярное обоснование этих теорий существует, однако, только для специальных молекулярных моделей. Эти модели не соответствуют общности применения континуальных теорий, так как содержат в себе сильные ограничения.

Уравнения гидродинамики обосновываются только для Больцмановского газа, ограниченного требованием достаточно малых плотностей.

Молекулярного обоснования гидродинамики для жидкого состояния не существует. Уравнения теории упругости выводятся из динамики кристаллической решетки для длинных акустических волн, однако этот вывод приводит к существенным трудностям при сопоставлении с опытом (см. главу VI, а также [14]).

Возникают следующие вопросы: не является ли «сплошность» в классических теориях следствием не усреднений дискретных

моделей по физически бесконечно малому объему, а результатом непрерывности функций распределения как первичного понятия, описывающего частицы, и уравнение теории сплошных сред — следствием законов сохранения для непрерывных функций распределения? Не является ли широкая общность практических применений гидродинамики (газы, жидкости) следствием общности функций распределения как первичного начала в описании движения частиц, справедливого вне зависимости от ограничений на плотность сред и конкретного вида молекулярных взаимодействий?

Мы продвинемся в направлении положительных ответов на поставленные вопросы, если покажем, не прибегая к усреднению по времени, пространству или начальным условиям и не накладывая ограничений на плотность среды и молекулярные взаимодействия, что уравнение гидродинамики есть автоматическое и точное следствие исходного уравнения для функций распределения.

Исходя из уравнений (I.6) и (I.7) излагаемой теории, вводя моменты от функций распределения первого, второго и высшего порядка

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{(\infty)} f d\mathbf{v}, \quad \mathbf{u} = \frac{\int_{(\infty)} \mathbf{v} f d\mathbf{v}}{\rho}, \quad \mathcal{P}_{\lambda\mu} = \int_{(\infty)} c_{\lambda} c_{\mu} f d\mathbf{v}, \tag{I.36}$$

$$S_{\lambda\mu\nu} = \int_{(\infty)} c_{\lambda} c_{\mu} c_{\nu} f d\mathbf{v} \quad (\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{u}),$$

умножая почленно исходное уравнение (I.7) на  $v_{\lambda}$ ,  $v_{\lambda}v_{\mu}$ ,  $v_{\lambda}v_{\mu}v_{\nu}$ , ... и интегрируя по всем значениям скоростей, придем [11] к следующей зацепляющейся цепочке уравнений, связывающей моменты функций распределений повышающегося порядка:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \rho u_{\mu} = 0,$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + u_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \right) u_{\lambda} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathcal{P}_{\lambda\mu}}{\partial x_{\mu}} + \frac{1}{\rho} \int_{(\infty)} \langle \dot{v}_{\lambda} \rangle f d\mathbf{v}, \tag{I.37}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho u^2}{2} + \frac{1}{2} \text{Sp } \mathcal{P}_{\lambda\mu} \right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \left[ \rho \frac{u^2}{2} u_{\mu} + \frac{1}{2} \text{Sp } \mathcal{P}_{\lambda\mu} + \mathcal{P}_{\mu\nu} u_{\nu} + \frac{1}{2} \text{Sp } S_{\mu\lambda\lambda} \right] = \int_{(\infty)} \langle \dot{v} \rangle_{\lambda} v_{\lambda} f d\mathbf{v},$$

. . . . .

Первые пять законов сохранения этой цепочки совпадают с гидродинамическими законами сохранения массы, импульса и энергии сплошной среды.

Вывод не предполагает какого-либо сглаживания (усреднения) или введения физически бесконечно малого объема, в связи с чем

операторы

$$\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_\lambda}, \int (\dots) dr dv$$

не изменяются, сохраняя при переходе к гидродинамике степень своей точности. Единственным допущением является требование достаточно быстрого убывания функции распределения с ростом скорости:

$$f(v, \dots) \Big|_{v_\lambda \rightarrow -\infty}^{v_\lambda \rightarrow +\infty} \rightarrow 0, \quad \lambda = 1, 2, 3. \quad (I.38)$$

Таким образом, в соответствии с опытными фактами исходная форма уравнений гидродинамики получается из излагаемой теории без ограничений на: 1) плотность среды, 2) величину физически бесконечно малого объема, 3) молекулярные взаимодействия.

Указанная общность не относится к детализации тензора напряжений  $\mathcal{P}_{\lambda\mu}$  и теплового тензора  $S_{\mu\lambda\lambda}$  через величины более низкого ранга, так как это требует дополнительной информации о функции распределения.

4. Поставим задачу о выяснении возможности и условий перехода от нелокального и несчетного описания частиц к классическому локализованному и счетному способу описания.

У исходного уравнения (I.7) будем искать локальные решения в виде дельта-функций типа

$$\begin{aligned} f(r, v, t) &= \sum_{s=1}^N \delta(r - r_s(t)) \delta(v - v_s(t)) = \\ &= \lim \sum_{s=1}^N f_s(r - r_s(t), v - v_s(t)), \end{aligned} \quad (I.39)$$

где  $f_s$  — пакеты вероятностей, описывающих движение каждой частицы,  $N$  — произвольное целое число,  $r_s(t)$  и  $v_s(t)$  — координаты скорости центра пакетов. Фигурирующий в (I.39) предел предполагает возможность стягивания пакетов в точку. Условия реализации стягивания должны быть получены из исходного уравнения.

Разобьем поле взаимодействий

$$U(r, t) = \sum_{s=1}^N \int K(|r - r'|) f_s dr' dv$$

на взаимодействие между пакетами вероятности и «самовоздействие» — взаимодействие между элементами внутри этих пакетов. Поле взаимодействий в районе местоположения  $l$ -й частицы,

обусловленное всеми другими частицами, есть

$$U(\mathbf{r}, t) |_{r \sim r_l} = \sum_{s=1}^N \int_{r' \sim r_s} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |_{r \sim r_l} f_s d\mathbf{r}' d\mathbf{v}. \quad (I.40)$$

«Самовоздействие» для  $l$ -й частицы выражается интегралом

$$\delta U |_{r \sim r_l} = \int_{r' \sim r_l} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_l |_{r \sim r_l} d\mathbf{r}' d\mathbf{v}. \quad (I.41)$$

После умножения исходного уравнения последовательно на  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{v}$  и интегрирования по переменным  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{v}$  в области протяженности статистического пакета с номером  $s$  получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iint_{(\Omega_s)} \mathbf{r} f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v} &= \iint_{(\Omega_s)} \mathbf{v} f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \iint_{(\Omega_s)} \mathbf{v} f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v} &= -\frac{1}{m} \iint_{(\Omega_s)} \nabla_r U \cdot f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (I.42)$$

где  $\Omega_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \Omega_s(\mathbf{r}) \Omega_s(\mathbf{v})$  — произведение пространственного и скоростного объемов, окружающих  $s$ -ю частицу. При выводе появились интегралы

$$\begin{aligned} \iint \mathbf{r} f_s v_n dS_n d\mathbf{v}, & \quad \iint \mathbf{r} f_s F_n(\mathbf{r}, t) d\Sigma_n d\mathbf{r}, \\ \iint \mathbf{v} f_s v_n dS_n d\mathbf{v}, & \quad \iint \mathbf{v} f_s F_n(\mathbf{r}, t) d\Sigma_n d\mathbf{r}, \\ F(\mathbf{r}, t) &= -\frac{1}{m} \nabla_r U(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Здесь  $dS_n$  и  $d\Sigma_n$  суть соответствующие проекции элементов поверхностей в трехмерных пространствах координат и скоростей.

Мы исключили возможность флуктуационного выброса частиц из объемов  $\Omega_s(\mathbf{r})$  и  $\Omega_s(\mathbf{v})$ , потребовав соблюдения условий на границах этих объемов

$$\mathbf{r} f_s = 0, \quad \mathbf{v} f_s = 0. \quad (I.43)$$

Стягивая объемы  $\Omega_s(\mathbf{r})$  и  $\Omega_s(\mathbf{v})$  к нулю, при условии сохранения нормировки

$$\lim_{\Omega_s \rightarrow 0} \iint_{(\Omega_s)} f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v} \neq 0$$

переходим к уравнениям движения Ньютона для центров тяжести статистических пакетов

$$\frac{d\mathbf{r}_s(t)}{dt} = \mathbf{v}_s(t), \quad \frac{d\mathbf{v}_s(t)}{dt} = -\frac{1}{m} \sum_{l=1}^N K(|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_l|) \nabla_{\mathbf{r}_s}. \quad (I.44)$$

Вывод аналогичен получению уравнений движения для центров тяжестей волновых пакетов в квантовой механике, с теми отличиями, что пакеты в излагаемой теории не распыляются с течением времени и в квантовой теории отсутствует явление «самовоздействия».

Принципиально важным для вывода является возможность пренебрежения влиянием суммарной силы от элементов статистического пакета на движение его центра тяжести:

$$\nabla_r \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_s |_{\substack{r \sim r_s \\ r' \sim r_s}} d\mathbf{r}' d\mathbf{v}.$$

Для выяснения этого вопроса будем исходить из простейшего парного потенциала вида

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{G}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

В интеграле «самовоздействия» имеются два стягивающихся параметра: эффективный радиус действия парного потенциала и линейный размер статистического пакета:

$$a = 1/\kappa,$$

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = \left[ \frac{\int \int_{(\Omega_s)} r^2 f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v}}{\int \int_{(\Omega_s)} f_s d\mathbf{r} d\mathbf{v}} \right]^{1/2}.$$

Соответственно двум случаям стягивания этих параметров к нулю возникают два вида разложений:

$$1) \delta U(\mathbf{r}) = a^2 \left( \alpha_1 \rho_s(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \alpha_2 a^2 \Delta \rho_s(\mathbf{r}) + \dots \right),$$

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_s(\mathbf{v})} f_s d\mathbf{v}, \quad \alpha_1 = 4\pi G \int_0^\infty x e^{-x} dx, \quad \alpha_2 = 4\pi G \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx,$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

2) В случае  $\langle r^2 \rangle \rightarrow 0$

$$\delta U(\mathbf{r}) = \left( \int_{\Omega_s(\mathbf{r})} \rho_s d\mathbf{r} \right) \left[ K(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_\alpha^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 K(\mathbf{r}) + \dots \right],$$

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{\int_{\Omega_s(\mathbf{r})} x_\alpha^2 \rho_s d\mathbf{r}}{\int_{\Omega_s(\mathbf{r})} \rho_s d\mathbf{r}}.$$

В первом случае, при достаточно малом радиусе действия сил отталкивания, член с «самовоздействием» может быть как угодно малым.

Требуется, чтобы размер пакета превышал радиус действия сил взаимодействия на малых расстояниях. В противоположном случае, когда размеры пакета меньше радиуса действия сил, налицо трудность: член с «самовоздействием» и его пространственные производные не малы, так как функция  $K(r)$  при  $r \rightarrow 0$  расходится. В итоге переход к локализованным частицам возможен, если соблюдаются неравенства

$$|r_s - r_l| \gg \langle x_a^2 \rangle^{1/2} \gg a = 1/\kappa$$

для любых частиц с координатами  $r_s$  и  $r_l$ . Таким образом, переход к классической теории требует наличия короткодействующих сил взаимодействия между частицами как обязательного условия, при этом линейные размеры статистического пакета должны быть велики в сравнении с радиусом действия короткодействующих сил.

5. Существование у исходного уравнения точки бифуркации, связанной с явлением кристаллизации.

Будем исходить из стационарного нелинейного уравнения для молекулярного потенциала

$$U(r) = C \int K(|r - r'|) e^{-U(r')/\theta} dr'. \quad (I.45)$$

При этом плотность вероятности местоположения атомов определяется распределением

$$\rho(r) = C e^{-U(r)/\theta}. \quad (I.46)$$

Уравнение для молекулярного потенциала имеет пространственно-однородное решение

$$U_i(r) = U_0 = \text{const}, \quad \rho(r) = \rho_0 = C e^{-U_0/\theta} = \text{const}. \quad (I.47)$$

Поставим задачу определения точек окончания пространственно-однородного решения и возникновения пространственно-периодических решений. Математически эта задача сводится к задаче о ветвлении решений нелинейных уравнений.

Исходное уравнение (I.45) можно записать в виде

$$\varphi(r) = \lambda \int_{(\infty)} K(|r - r'|) e^{\varphi(r')} dr' \quad \left( \varphi = -\frac{U}{\theta}, \quad \lambda = -\frac{C}{\theta} \right). \quad (I.48)$$

Пусть при  $\lambda = \lambda_0$  и  $\varphi = \varphi_0$  имеет место окончание однородного решения, при этом  $\lambda_0$  должно быть определено, а  $\varphi_0$  находится из уравнения

$$\varphi_0 = \lambda_0 e^{\varphi_0} \sigma^-(0), \quad (I.49)$$

где

$$\sigma^-(0) = \int_{(\infty)} K(|r - r'|) dr' = 4\pi \int_0^\infty K(s) s^2 ds.$$

Для выяснения поведения решения в окрестности значений  $\lambda_0$  и  $\varphi_0$  положим

$$\lambda = \lambda_0 + \varepsilon, \quad \varphi = \varphi_0 + u(r). \quad (\text{I.50})$$

Для определения  $u(r)$  имеем согласно (I.48) уравнение

$$\varphi_0 + u(r) = (\lambda_0 + \varepsilon) \int_{(\infty)} K(|r - r'|) e^{\varphi_0 + u(r')} dr'.$$

Разлагая подынтегральное выражение в степенной ряд по  $u(r)$ , приведем его к следующему:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[u(r)] = \tau \sigma(0) + \tau \int_{(\infty)} K(|r - r'|) u(r') dr' + \\ + (\lambda_0^* + \tau) \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\infty)} K(|r - r'|) u^n(r') dr', \end{aligned}$$

или

$$\mathcal{L}[u(r)] = u(r) - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) u(r') dr',$$

где

$$\lambda_0^* = \lambda_0 e^{\varphi_0}, \quad \tau = \varepsilon e^{\varphi_0}, \quad \sigma(0) = 4\pi \int_0^{\infty} K(s) s^2 ds.$$

Исследуем линейное уравнение

$$u(r) = \lambda_0 e^{\varphi_0} \int_{(\infty)} K(|r - r'|) u(r') dr'. \quad (\text{I.51})$$

В соответствии с задачей о возникновении периодических структур из однородной среды ищем решение в виде

$$u(r) = A e^{ikr}. \quad (\text{I.52})$$

Имеем

$$e^{ikr} = \lambda_0 e^{\varphi_0} \cdot e^{ikr} \int_{(\infty)} K(|r - r'|) e^{-ik(r-r')} dr'. \quad (\text{I.53})$$

Вычисляя интеграл, получим

$$\begin{aligned} \int_{(\infty)} K(|r - r'|) e^{-ik(r-r')} dr' &= 2\pi \int_0^{\infty} K(s) s^2 ds \int_0^{\infty} e^{-iks} \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin ks}{ks} s^2 ds. \quad (\text{I.54}) \end{aligned}$$

Таким образом, приходим к следующему критерию возникновения

периодических решений:

$$1 - \lambda_0 e^{\varphi_0} 4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin ks}{ks} s^2 ds = 0. \quad (I.55)$$

Так как

$$\lambda_0 e^{\varphi_0} = -\frac{\rho}{\theta}, \quad \sigma(k) \equiv 4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin ks}{ks} s^2 ds, \quad (I.56)$$

критерий (I.55) можно записать как условие на температуру, плотность среды и силы взаимодействия

$$\theta/\rho = -\sigma(k). \quad (I.57)$$

Если молекулярные взаимодействия таковы, что  $\sigma(k) < 0$  в области хотя бы некоторого интервала значений  $k$ , причем внутри интервала

$$\left. \frac{d\sigma(k)}{dk} \right|_{k=k_0} = 0,$$

то при достаточно малых температурах или значительных плотностях скачкообразно возникает действительное решение уравнения с  $k = k_0$  (рис. 3).

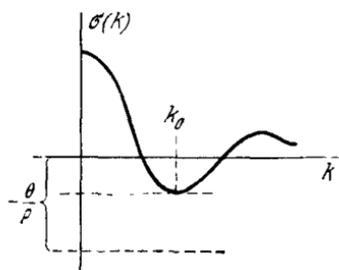


Рис. 3.

Пространственный период  $2\pi/k_0$  определяется молекулярными силами. Возникновение периодических решений из пространственно-однородного распределения можно отождествить с явлением кристаллизации.

Критерий кристаллизации (I.57) дает возможность подойти к объяснению так называемых кривых плавления Симона (см. главу II).

Исходное нелинейное уравнение позволяет определить характер изменения амплитуд периодических гармоник при удалении значений  $\rho$  и  $\theta$  от значений, соответствующих началу кристаллизации.

Для определения подобного решения используем разложение

$$u(r) = \tau^{1/n} f_1(r) + \tau^{2/n} f_2(r) + \tau^{3/n} f_3(r) + \dots$$

Полагая  $n = 2$ , можно добиться разрешения всех уравнений последовательных приближений, причем лишь случай  $n = 2$  приводит к периодическим решениям.

В результате получается решение в виде [7, 8]

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} \tau^{\frac{2m+1}{2}} \left[ \sum_{l=1}^{\infty} A_{2l+1}^{(2m+1)} \sin(2l+1)kr + C_{2m+1} \sin kr \right] + \\ + \sum_{m=1}^{\infty} \tau^m \left[ \sum_{l=0}^{\infty} B_{2l}^{(2m)} \cos 2mlkr + C_{2m} \sin kr \right], \quad (I.58)$$

где коэффициенты  $A_{2l+1}^{(2m+1)}$ ,  $B_{2l}^{(2m)}$ ,  $C_{2m+1}$ ,  $C_{2m}$  определяются уравнениями соответствующих приближений и условиями их разрешимости.

Полученные ряды сходятся по крайней мере в окрестности  $\tau \sim 0$  и, таким образом, представляют точное решение.

6. Существование пространственно-периодического решения для случая «пологих» молекулярных потенциалов.

Трехмерные периодические решения можно представить в виде ряда Фурье для плотности частиц  $\rho(\mathbf{r})$  и молекулярного потенциала  $U(\mathbf{r})$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n, l, m=-\infty}^{\infty} a_{nlm} \exp(inax + ilby + imcz), \quad (I.59)$$

$$U(\mathbf{r}) = \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \\ = \sum_{n, l, m} a_{nlm} \sigma(na, lb, mc) \exp(inax + ilby + imcz),$$

где

$$\sigma(na, lb, mc) = \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r}|) \exp(inax + ilby + imcz) d\mathbf{r}. \quad (I.60)$$

С другой стороны, выражение для молекулярного потенциала содержит член самовоздействия

$$\delta U(\mathbf{r}) = \int_{(\Omega)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \Omega = abc, \quad (I.61)$$

который представим в виде двух рядов

$$\delta U(\mathbf{r}) = \left( \int_{(\Omega)} K(|\mathbf{s}|) d\mathbf{s} \right) \left[ \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle s_{\alpha}^2 \rangle \partial_{x_{\alpha}}^2 \rho(\mathbf{r}) + \dots \right], \\ \delta U(\mathbf{r}) = \left( \int_{(\Omega)} \rho(\mathbf{s}) d\mathbf{s} \right) \left[ K(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_{\alpha}^2 \rangle \partial_{x_{\alpha}}^2 K(\mathbf{r}) + \dots \right], \quad (I.62)$$

где  $\langle s_{\alpha}^2 \rangle$  и  $\langle x_{\alpha}^2 \rangle$  — эффективные протяженности функций  $\rho(\mathbf{r})$  и

$K(r)$  в окрестности узлов решетки. Оба ряда удобны для случаев

$$\frac{\langle s_\alpha^2 \rangle}{\langle x_\alpha^2 \rangle} \ll 1 \quad \text{и} \quad \frac{\langle s_\alpha^2 \rangle}{\langle x_\alpha^2 \rangle} \gg 1 \quad (I.63)$$

соответственно.

Оба ряда указывают на значительные изменения функции  $\delta U(r)$  внутри элементарной ячейки кристалла, так как в реальных условиях  $\langle s_\alpha^2 \rangle^{1/2}$  и  $\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}$  значительно меньше периода решетки. Назовем «пологими» молекулярные потенциалы, в которых амплитуды изменений потенциала самовоздействия внутри элементарных ячеек малы в сравнении с потенциалом взаимодействия между различными элементарными ячейками. Выразим это требование на языке амплитуд ряда Фурье.

Ввиду наличия неравенства между пространственными интервалами изменения функций и соответствующими интервалами волновых чисел

$$\Delta x_\alpha \Delta k_\alpha \geq 1 \quad (\alpha = 1, 2, 3),$$

можно заключить, что требование «пологости» молекулярных потенциалов должно заключаться в запрете существования больших значений волновых чисел. Поэтому в дальнейшем будем считать за выражение крайней формы «пологости» то, что величина  $\sigma(k)$ , где  $k^2 = n^2 a^2 + l^2 b^2 + m^2 c^2$ , отлична от нуля только в том случае, если все  $n, l, m$  равны нулю, либо из трех чисел  $n, l, m$  одно равно единице, а остальные два равны нулю.

В работе [18] показано, что использование «пологих» потенциалов в указанном смысле дает возможность получить точное пространственное периодическое решение в конечном виде и в широком диапазоне температур. Рассмотрим появление периодических решений, ограничиваясь вначале простейшим случаем — одномерной задачей.

Подставляя в исходное уравнение (I.45) предполагаемое решение, выбираемое по (I.59):

$$\rho(r) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{inax}$$

( $a = 2\pi/d$ ,  $d$  — период одномерного кристалла), и приравнивая фурье-компоненты правой и левой частей, получим следующую систему уравнений для определения коэффициентов Фурье  $a_n$ :

$$a_n = \frac{C}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp \left[ -\frac{1}{\theta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sigma(al) e^{il\xi} - in\xi \right] d\xi, \quad (I.64)$$

где  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,

$$\sigma(al) = \int_{(\infty)} K(|r|) e^{ialx} dr. \quad (I.65)$$

Постоянный коэффициент  $C$  выражается через суммарную плотность в элементарной ячейке

$$C = \left( \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right) \left\{ \int_{(\Omega)} \exp \left[ -\frac{1}{\theta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sigma(al) a_l e^{ilax} \right] d\mathbf{r} \right\}^{-1}. \quad (I.66)$$

Для случая «пологих» потенциалов полагаем

$$\sigma(na) = 0 \quad \text{для} \quad n = \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (I.67)$$

благодаря чему все коэффициенты  $a_n$  выражаются через один:

$$a_n = \frac{C}{\pi} \int_0^{\pi} \exp \left[ -\frac{2}{\theta} \sigma(a) a_1 \cos \xi \right] \cos n\xi \, d\xi, \quad n = 0, \pm 1, \dots, \quad (I.68)$$

$$C = \left( \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right) \frac{1}{abc} \left\{ \int_0^{\pi} \exp \left[ -\frac{2}{\theta} \sigma(a) a_1 \cos \xi \right] d\xi \right\}^{-1};$$

при этом учтено условие вещественности плотности:  $a_{-n} = a_n^+$  (заметим, что постоянный множитель  $\exp[-\sigma(0)a_0/\theta]$  сократился). Интегралы в этих соотношениях выражаются через функции Бесселя мнимого аргумента

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{z \cos \vartheta} \cos n\vartheta \, d\vartheta = I_n(z),$$

поэтому

$$a_n = C I_n(-2\sigma(a)a_1/\theta),$$

$$C = \left( \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right) / [abc I_0(-2\sigma(a)a_1/\theta)]. \quad (I.69)$$

Если ввести обозначение

$$\frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} = a_0,$$

то (полагая  $n = 1$ ) найдем, что амплитуды  $a_0$  и  $a_1$  оказываются связанными следующим равенством:

$$a_1 I_0(-2\sigma(a)a_1/\theta) = a_0 I_1(-2\sigma(a)a_1/\theta). \quad (I.70)$$

Основываясь на выражении

$$\rho(x) = C \exp \left[ -\frac{1}{\theta} (a_0 + 2a_1 \sigma(a) \cos ax) \right],$$

находим окончательную формулу для распределения плотности в одномерной модели кристалла:

$$\rho(x) = \frac{1}{abc} \left( \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right) \cdot \frac{1}{I_0 \left( -\frac{2\sigma(a)a_1}{\theta} \right)} \exp \left( -2 \frac{\sigma(a)a_1}{\theta} \cos ax \right), \quad (I.71)$$

где  $a_1$  определяется из соотношения

$$a_1 I_0 \left( -\frac{2\sigma(a) a_1}{\theta} \right) = \frac{1}{abc} \left( \int_{(\Omega)} \rho dr \right) I_1 \left( -\frac{2\sigma(a) a_1}{\theta} \right).$$

Последнее соотношение выполняется прежде всего для случая  $a_1 = 0$ , что соответствует пространственно-однородному распределению частиц

$$\rho(x) = \text{const.}$$

Оно может иметь решение  $a_1 \neq 0$  лишь в том случае, если

$$\sigma(a) = \int_{(\infty)} K(|r|) e^{iax} dr < 0,$$

что видно из сопоставления знаков левой и правой частей. Это неравенство есть одно из условий, накладываемых на силы взаимодействия, для существования периодического решения. Перепишем анализируемое выражение в следующем виде:

$$z I_0(z) = -\frac{2\sigma(a)}{\theta} \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr I(z). \tag{I.72}$$

Используя свойства функции Бесселя мнимого аргумента

$$\begin{aligned} I_0(x) > I_1(x), & \quad I_0 \approx 1, & \quad I_1 \approx x/2 \quad \text{при } x \rightarrow 0, \\ I_0''(x) > 0, & \quad x I''(x) > 0, & \quad x I_2'(x) > 0 \quad \text{при } x \neq 0, \end{aligned}$$

можно установить, что, если

$$\theta < -\sigma(a) \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr,$$

то уравнение для  $z$  имеет два действительных решения, не равных нулю. Если неравенство изменяется на обратное, то имеет место только решение  $z = 0$ .

Точка бифуркации соответствует прежнему условию кристаллизации (I.57). Вблизи температуры кристаллизации амплитуда периодической структуры  $a_1$  мала. В этом случае можно использовать выражения функций  $I_0(x)$  и  $I_1(x)$  при малых значениях аргумента

$$I_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(n+k+1)} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k} ;$$

в результате получаем приближенную формулу

$$\tilde{a}_1^2 = \frac{2}{\sigma(a)} \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr (\theta - \theta_0) \left[ 1 + \frac{2}{3\theta} (\theta - \theta_0) + \dots \right],$$

где

$$\theta_0 = -\sigma(a) \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr,$$

указывающую на характерную зависимость амплитуды структуры от температуры вблизи точки кристаллизации.

Исследуем случай низких температур в сравнении с температурой кристаллизации  $\theta_0$ . При  $\theta \rightarrow 0$  аргумент функций Бесселя  $-2\sigma(a)a_1/\theta$  велик, если считать, что период структуры мало зависит от температуры. Воспользуемся асимптотической формулой

$$I_n(x) \sim \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2x)^k} \frac{\Gamma(n+k+1/2)}{k! \Gamma(n-k+1/2)},$$

находим

$$a_1 = a_0 + \frac{0}{4\sigma(a)} - \frac{3\theta^2}{32\sigma^2(a)a_0} + \dots, \quad a_0 = \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr.$$

В этом приближении выражение для  $\rho(x)$  приобретает вид

$$\rho(x) \approx 2 \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr \left( \frac{-\pi\sigma(a)a_1}{\theta} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{2\sigma(a)a_1}{\theta} (1 - \cos ax) \right].$$

Если  $\cos ax$  не равен единице, то это выражение стремится к нулю при  $\theta \rightarrow 0$  (напомним, что  $\sigma(a) < 0$ ). Если же  $\cos ax = 1$ , то это выражение стремится к бесконечности. Интеграл же от плотности  $\rho(x)$  по периоду структуры конечен и равен  $2\pi \int_{(\Omega)} \rho dr / abc$ .

Отсюда следует

$$\rho(x) \approx 2\pi \frac{1}{abc} \int_{(\Omega)} \rho dr \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta \left( x - \frac{2\pi m}{a} \right),$$

т. е. результат, который был получен ранее.

В итоге, рассматривая модель особо «пологих» молекулярных потенциалов, приходим к решению, описывающему кристаллическое состояние во всем доступном интервале температур.

Рассмотренный одномерный случай легко обобщается на трехмерный. Система уравнений для определения амплитуд Фурье

$$a_{nlm} = \frac{C}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp \left[ -\frac{1}{\theta} \sum_{n',l',m'} a_{n'l'm'} \sigma(n'a, l'b, m'c) \times \right. \\ \left. \times \exp(in'\xi_1 + il'\xi_2 + im'\xi_3) - in\xi_1 - il\xi_2 - im\xi_3 \right] d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3, \\ n, l, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

при условии выбора достаточно «пологих» потенциалов принимает вид

$$a_{nlm} = CI_n' \left( -\frac{2\sigma(a) a_{100}}{\theta} \right) I_l \left( -\frac{2\sigma(b) a_{010}}{\theta} \right) I_m \left( -\frac{2\sigma(c) a_{001}}{\theta} \right).$$

Условие «пологости» потенциалов в трехмерном случае накладывает ограничения на

$$\sigma(na, lb, mc) = \int_{(\infty)} K(|r|) \exp(inax + ilby + imcz) dr;$$

предполагается, что  $\sigma$  отлична от нуля только в том случае, если все  $n, l, m$  равны нулю, либо из трех чисел одно равно единице, а остальные два равны нулю.

Связь между  $a_{000}$  и амплитудами  $a_{100}, a_{010}, a_{001}$  приводит к системе

$$\begin{aligned} a_{100} I_0 \left( -\frac{2\sigma(a) a_{100}}{\theta} \right) &= a_{000} I_1 \left( -\frac{2\sigma(a) a_{100}}{\theta} \right), \\ a_{010} I_0 \left( -\frac{2\sigma(b) a_{010}}{\theta} \right) &= a_{000} I_1 \left( -\frac{2\sigma(b) a_{010}}{\theta} \right), \\ a_{001} I_0 \left( -\frac{2\sigma(c) a_{001}}{\theta} \right) &= a_{000} I_1 \left( -\frac{2\sigma(c) a_{001}}{\theta} \right). \end{aligned} \quad (I.73)$$

Плотность вероятности местоположения частиц имеет простой вид

$$\rho(r) = C \exp \left[ -\frac{2}{\theta} \sigma(a) a_{100} \cos ax - \frac{2}{\theta} \sigma(b) a_{010} \cos by - \frac{2}{\theta} \sigma(c) a_{001} \cos cz \right]. \quad (I.74)$$

Ценность решений, найденных на этом пути, заключается в возможности получения аналитического выражения, описывающего периодическую структуру кристалла и справедливого во всем интервале температур: от абсолютного нуля до температур плавления. Недостаток этих решений — в сильно ограничивающих требованиях «пологости» для потенциалов взаимодействия атомов, образующих кристалл.

**§ 1. Пространственно-периодические решения  
для вероятностей местоположения частиц  
при достаточно низких и промежуточных температурах**

В классической динамической теории решетки Борна периодическое распределение атомов в кристалле не выводится для реальных физических условий существования кристаллов, а постулируется с самого начала развития теории.

Постулат, обосновывающий периодическую структуру кристаллов, вводится неявно, он связан с требованием локализации атомов в окрестности узлов решетки. Структура классической теории следующая.

В своем основном варианте теория исходит из уравнений механики для поведения частиц в кристалле

$$m_k \ddot{u}_\alpha \binom{l}{k} = - \frac{\partial \Phi}{\partial u_\alpha \binom{l}{k}}, \quad \Phi \binom{l}{k} = \sum_{l'k'} \Phi \binom{l-l'}{k-k'}. \quad (\text{II.1})$$

В стационарном случае  $\partial/\partial t = 0$  уравнения механики приводят к минимуму потенциальной функции:

$$\sum_{l'k'} \Phi \binom{l-l'}{k-k'} = \min.$$

Возникает задача о распределении центров сил в пространстве так, чтобы в каждой точке с фиксированным значением  $l$  (номера ячейки) и  $k$  (номера атомов в ячейке) существовал минимум указанной функции.

Для сил взаимодействия, имеющих «потенциальную яму», эта задача решается положительно и приводит к определению размеров элементарной ячейки. Однако возникшая задача имеет чисто геометрический характер: она не связана ни с инерциальными, ни со статистическими, ни с термодинамическими условиями существования кристаллов.

Наиболее жесткое требование в такой постановке задачи заключается в том, что на пути введения кристаллической решетки требуется постулировать абсолютный нуль температуры, так как в механике не имеется статистических разбросов.

Поскольку абсолютный нуль недостижим, требуется оправдание задачи и ее результатов. Задача о минимуме, взятая сама по себе, свободна от требования наличия частицы в каждой точке минимума, так как эта задача не меняется от величины множителя, указывающего на долю вероятности местоположения частицы в узле.

Оправдание реальности поставленной задачи производится путем максимального заполнения узлов решетки вероятностями местоположения частиц с тем, чтобы можно было использовать классическую или квантовую механику для исследования поведения каждого атома около соответствующего узла. На этом пути выводятся линейные и нелинейные колебания решетки. Гамильтоновское описание последних при дальнейшем использовании метода Гиббса позволяет развивать термодинамику кристаллов. В этом же направлении возникли разделы молекулярного обоснования теории упругости, оптики кристаллов и другие разделы физики кристаллов.

Однако постулат, связывающий геометрическую задачу с реальными свойствами кристаллов, основывается на радикальном физическом ограничении — локализации каждого атома в окрестности фиксированного узла решетки. Таким образом, оправдание периодической структуры кристаллов производится за счет введения следующих физических гипотез:

1. Локализация атомов в окрестности узлов для любого момента времени и вследствие этого отказ от свободы перемещения атомов по кристаллу.

2. Совокупность атомов в кристалле есть целое число — предпосылка, которая не подтверждена экспериментальными данными.

3. Непротиворечивость введения понятия вероятности и механического описания поведения частиц.

В работах [3—20] развивается иная модель кристалла. В этой модели, в отличие от очерченной выше, периодическая структура кристаллов не является следствием ограничений на свободу перемещения атомов по кристаллу, а обусловлена специфичностью статистических законов движения частиц, согласовывающих периодическую структуру со свободой перемещения атомов, в результате чего вероятность встретить атом в междоузлиях всегда отлична от нуля. Для описания стационарных свойств кристалла будем исходить из температурных функций распределения, характеризующихся стационарностью и статистической независимостью распределений по отношению к координатам и скоростям:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r})w(v^2). \quad (\text{II.2})$$

На этом пути (см. главу I) приходим к нелинейному интегральному уравнению для определения молекулярного потенциала

$U(\mathbf{r})$  и функции распределения по скоростям  $w(v^2)$ :

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= C \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}', \\ \rho(\mathbf{r}) &= C e^{-U(\mathbf{r})/\theta}, \quad w(v^2) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2\theta}, \end{aligned} \quad (\text{II.3})$$

или равноправному нелинейному уравнению для плотности  $\rho(\mathbf{r})$ :

$$\rho(\mathbf{r}) = C \exp \left[ -\frac{1}{\theta} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right], \quad (\text{II.4})$$

где температура  $\theta$  — параметр, появившийся при разделении переменных.

Наложим на предполагаемые решения некоторые условия, выполнимость которых проверяется после получения решения.

1. Условие трансляционной симметрии

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}), \quad (\text{II.5})$$

где  $h, k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

2. Наличие потенциальной ямы для функции  $U(\mathbf{r})$  в точках

$$\mathbf{r} = h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}. \quad (\text{II.6})$$

3. Малость эффекта самовоздействия в сравнении с взаимодействиями. Наличие самовоздействия характерно для нелокальной статистической теории. Используем условие периодичности и запишем исходное уравнение, рассматривая сначала простую кубическую решетку:

$$U(\mathbf{r}) = C \int_{(abc)} \left[ \sum_{h,k,l} K(|\mathbf{r} - h\mathbf{a} - k\mathbf{b} - l\mathbf{c} - \mathbf{r}'|) \right] e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}' + \delta U_s(\mathbf{r}), \quad (\text{II.7})$$

$$\delta U_s(\mathbf{r}) = C \int_{(abc)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}',$$

где выделен член  $\delta U_s$ , который мы в дальнейшем будем называть самовоздействием. Ядро в первом интеграле будем обозначать через  $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ :

$$\tilde{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{h,k,l} K(|\mathbf{r} - h\mathbf{a} - k\mathbf{b} - l\mathbf{c} - \mathbf{r}'|). \quad (\text{II.8})$$

Перейдем к другой форме интегрального уравнения, которая приведет нас к его решению. При этом постоянную  $C$  выразим через нормировку плотности вероятности на элементарную ячейку в кристалле

$$C = \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \frac{1}{\int_{(abc)} e^{-U(\mathbf{r})/\theta} d\mathbf{r}}. \quad (\text{II.9})$$

Разлагая ядро  $\tilde{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  в ряд Тейлора относительно переменной  $\mathbf{r}'$  и предполагая симметрию вероятности местоположения атомов  $\rho(\mathbf{r})$  около узлов относительно преобразований  $x_\alpha \rightarrow -x_\alpha$ , получаем

$$U(\mathbf{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \left[ 1 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_\alpha^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (3 - 2\delta_{\alpha\beta}) \langle x_\alpha^2 x_\beta^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 \partial_{x_\beta}^2 + \dots \right] \tilde{K}(\mathbf{r}) + \delta U_s(\mathbf{r}), \quad (\text{II.10})$$

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \int_{(abc)} x_\alpha^2 e^{-U(\mathbf{r})/\theta} d\mathbf{r} / \int_{(abc)} e^{-U(\mathbf{r})/\theta} d\mathbf{r}, \\ \langle x_\alpha^2 x_\beta^2 \rangle = \int_{(abc)} x_\alpha^2 x_\beta^2 e^{-U(\mathbf{r})/\theta} d\mathbf{r} / \int_{(abc)} e^{-U(\mathbf{r})/\theta} d\mathbf{r}, \dots$$

Если потенциальная функция  $U(\mathbf{r})$  имеет яму в узлах, то используя для оценки интегралов асимптотический метод Лапласа и полагая  $\theta$  достаточно малой величиной, получаем решение. Первые члены асимптотического ряда конкретизируются следующими значениями коэффициентов:

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_\alpha}^2 \tilde{K}} \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^{-1}, \\ \langle x_\alpha^2 x_\beta^2 \rangle = \frac{\theta^2}{\partial_{x_\alpha}^2 \tilde{K} \cdot \partial_{x_\beta}^2 \tilde{K}} \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^{-2}; \quad (\text{II.11})$$

плотность в окрестности узла определяется так:

$$\rho(\mathbf{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 (2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{x_\alpha^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle}\right), \quad (\text{II.12})$$

где производные  $\tilde{K}(\mathbf{r})$  берутся в центре узлов решетки. В этом случае полученный ряд для молекулярного потенциала является решением исходного уравнения. При этом предполагается, что существуют условия, которые должны быть определены и для которых второй член самовоздействия  $\delta U_s(\mathbf{r})$  значительно меньше первого.

1. Полученное решение ограничивается условием применимости асимптотического метода Лапласа, накладывающего ограничение на область  $(x_1, x_2, x_3)$  функции  $U(\mathbf{r})$ , линейные размеры этой области должны быть порядка «радиуса влияния». Если начало координат помещено в центре узла, то

$$|x_\alpha| \ll \left[ \frac{\theta}{\partial_{x_\alpha}^2 \tilde{K}} \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} \right]^{1/2} \ll (abc)^{1/3}. \quad (\text{II.13})$$

Вне этой области, взятой около произвольного узла, решение не определено.

2. Найденное решение является только «почти» классическим, так как имеет место одновременное сосуществование вероятности местоположения атомов в разных участках пространства внутри «радиуса влияния», не вызванное усреднением, а обусловленное первичностью нелокальных представлений. Это одно из следствий теории, которое может подвергнуться экспериментальной проверке, для чего требуется точность измерения времен  $\sim 10^{-14}$  сек при фиксировании вероятности местоположения атомов с точностью  $10^{-9}$  см.

3. Условие существования потенциальной ямы в суммарном потенциале имеет место, если энергия взаимодействия отдельных пар атомов, т. е.  $K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ , имеет потенциальную яму. Для количественных расчетов будем конкретизировать парные взаимодействия набором экранированных потенциалов, удобных для металлов, и степенных функций для диэлектрических кристаллов, даваемых (I.12).

4. Выражения (I.12) описывают взаимодействие на расстояниях, достаточно близких к центру потенциальной ямы. Для меньших расстояний в обоих случаях предполагается монотонный спад сил отталкивания.

К сожалению, не существует единого подхода к силовым взаимодействиям на расстояниях  $< 10^{-8}$  см. Эту область следует разбить на две: а) внутри «радиуса влияния»  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \lesssim \lesssim \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2} \sim 10^{-9}$  см и б) промежуточную область между значениями  $r = \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}$  и  $r = r_1$ , где  $r_1$  удовлетворяет условию  $K(r_1) = 0$ .

Возможность проникновения частиц внутрь указанных областей зависит от кинетической энергии сближения частиц.

Можно положить, что  $K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \{f\})$  дается формулой (I.15)

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \{f\}) = \begin{cases} \frac{G}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \geq r_0, \\ \infty, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < r_0, \end{cases} \quad (\text{I.14})$$

где радиус непроницаемой сферы определяется из равенства

$$\frac{G}{r_0} e^{-\alpha r_0} = \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f dv \Big/ \int_{(\infty)} f dv. \quad (\text{I.15})$$

Величина  $r_0$  в случае больших энергий сближения лежит в первой области (внутри «радиуса влияния»), в случае малых — во второй области, приближаясь снизу к значению порядка  $r_1$ .

5. Интеграл в члене самовоздействия

$$\delta U_s(\mathbf{r}) = \int_{(abc)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (\text{II.16})$$

представим в виде ряда в двух предельных случаях. Используя детализацию  $K(|r - r'|, \{f\})$  в виде (I.14), разложим в ряд Тейлора функцию  $\rho(r')$  в окрестности точки  $r$ , получим

$$\delta U_s(r) = a_0^3 \left[ \alpha_1 \rho(r) + \frac{1}{2} \alpha_2 a_0^2 \Delta \rho(r) + \dots \right], \tag{II.17}$$

$$\alpha_1 = 4\pi G \int_{r_0/a_0}^{\infty} t e^{-t} dt, \quad \alpha_2 = 4\pi G \int_{r_0/a_0}^{\infty} t^3 e^{-t} dt, \dots$$

Коэффициенты  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots$  содержат множителем фактор  $e^{-r_0/a_0}$ , поэтому в случаях достаточно малого радиуса действия сил  $a_0 \ll r_0$  член самовоздействия оказывается экспоненциально малым.

В противоположном случае  $a_0 \gg r_0$  самовоздействием можно пренебречь только при жестком условии

$$\frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} < 1, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Во втором случае, разлагая функцию  $K(|r - r'|)$  в ряд Тейлора по величине смещения  $r'$ , получаем

$$\delta U_s(r) = \left( \int_{(abc)} \rho dr \right) \left[ K(r) + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_\alpha^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 K(r) + \dots \right]. \tag{II.18}$$

Использование первых членов разложения (II.18)

1) правомерно вне непроницаемой сферы с радиусом, равным  $r_0$ ,

$$|r| > r_0;$$

2) предполагает достаточную «пологость» потенциальной функции  $K(|r|)$ : эффективный радиус действия этой функции должен быть велик в сравнении с радиусом теплового разброса

$$\frac{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}}{a_0} \ll 1, \quad a_0 = \frac{1}{\kappa}.$$

При условии  $r_0 \gg a_0$  применительно ко второму случаю «самовоздействие»  $\delta U_s(r)$  является экспоненциально малой величиной. В обратном случае  $r_0 \rightarrow 0$   $\delta U_s(r)$  может быть как угодно большим числом, вследствие чего этим членом в исходном уравнении нельзя пренебречь.

По последней причине полученное выше периодическое решение перестает существовать. Эта ситуация возникает при условиях

$$\frac{r_0}{a_0} \ll 1, \quad \frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \gg 1.$$

В итоге решение исходного уравнения (II.3) в виде тройкопериодической функции для молекулярного потенциала имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \left[ 1 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_{\alpha}^2 \rangle \partial_{x_{\alpha}}^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (3 - 2\delta_{\alpha\beta}) \partial_{x_{\alpha}}^2 \cdot \partial_{x_{\beta}}^2 + \dots \right] \tilde{K}(\mathbf{r}), \quad (\text{II.19})$$

где  $\tilde{K}(\mathbf{r})$  дается формулой (II.8) и для плотности вероятности местоположения атомов имеем

$$\rho(\mathbf{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \sum_{h,k,l} (2\pi \langle x_1^2 \rangle \cdot 2\pi \langle x_2^2 \rangle \cdot 2\pi \langle x_3^2 \rangle)^{-1/2} \times \\ \times \exp \left[ -\frac{(x_1 - ha)^2}{2 \langle x_1^2 \rangle} \right] \cdot \exp \left[ -\frac{(x_2 - kb)^2}{2 \langle x_2^2 \rangle} \right] \cdot \exp \left[ -\frac{(x_3 - lc)^2}{2 \langle x_3^2 \rangle} \right]. \quad (\text{II.20})$$

Резюмируя, отметим, что

1) периодическая структура кристаллов выводится из уравнения, более приближающегося к реальной ситуации, в которой находится кристаллическое состояние, чем в подходе Борна: в последнем приходится исходить из состояния частиц с абсолютной температурой, равной нулю;

2) важным моментом вывода является отсутствие ограничения свободы перемещения атомов по кристаллу, так как нормировка вероятности местоположения атомов в элементарной ячейке

$$\int_{(abc)} \rho d\mathbf{r}$$

остается произвольной величиной.

Как мы увидим ниже, эта величина является термодинамическим параметром и входит в уравнение состояния кристалла, определяя его реальный объем при заданной массе тела;

3) характерной особенностью полученного решения является то, что оно отображает периодическую структуру, сохраняющую строгую периодичность, независимо от значения температуры.

Температура влияет на параметры периодичности, в частности на дисперсию вероятности местоположения атомов в окрестности узлов, но не нарушает строгой периодичности.

Это также отличает рассматриваемую теорию от классической, в которой температура связывается с интенсивностью акустических шумов в кристалле, нарушающих его периодическую структуру. Может ли оказаться в эксперименте (лауэграммах) это различие, рассматривается в главе VII.

## § 2. Определение пространственного периода, температурного разброса и энергии связи атомов в кристалле

Определение периодов трехмерной структуры сводится к определению величин  $a, b, c$  из условия минимума потенциальной функции  $U(\mathbf{r})$  в точках  $\mathbf{r} = ha + kb + lc$

$$\begin{aligned} \nabla_r U(\mathbf{r}) = & \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r}' \right) \left[ 1 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_\alpha^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (3 - 2\delta_{\alpha\beta}) \langle x_\alpha^2 x_\beta^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 \partial_{x_\beta}^2 + \dots \right] \nabla_r \tilde{K}(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (II.21)$$

Рассмотрим частные случаи взаимодействий.

Для потенциалов Ленарда — Джонса, выбирая в (I.13)  $n = 12$  и  $6$  и вводя число реальных соседей  $z_m$  в слое с радиусом  $\beta_m r_{II}$ , где  $\beta_m$  — структурные коэффициенты,  $r_{II}$  — минимальное расстояние между узлами, получаем

$$\tilde{K}_{II}(r_{II}) = 4u \left[ \left( \frac{r_1}{r_{II}} \right)^{12} Z_{12} - \left( \frac{r_1}{r_{II}} \right)^6 Z_6 \right], \quad (II.22)$$

где  $Z_p$  — эффективное число соседей:

$$Z_p = \sum_{m \geq 1} \frac{z_m}{\beta_m^p}. \quad (II.23)$$

Требование минимума дает следующую величину периода решетки:

$$r_{II} = r_1 \left( 2 \frac{Z_{12}}{Z_6} \right)^{1/6}. \quad (II.24)$$

Для взаимодействия типа экранированных потенциалов, удерживая только ближайших соседей на расстояниях  $r_1$ , находим для определения  $r_1$  уравнение

$$r_1 = \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1} \ln \frac{G_2 (\kappa_2 r_1 - 1)}{G_1 (\kappa_1 r_1 + 1)}; \quad (II.25)$$

решением является функция параметров взаимодействия  $G_1, G_2, \kappa_1, \kappa_2$ :

$$r_1 = \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1} \ln \frac{G_2 \kappa_2}{G_1 \kappa_1}, \quad (II.26)$$

при условии

$$\kappa_2 r_1 > \kappa_1 r_1 > 1, \quad G_2 > G_1. \quad (II.27)$$

Определение периодов молекулярного потенциала приводит к требованию

$$\nabla_r \sum_{h,k,l} K[\mathbf{r} - (ha + kb + lc)]|_{\mathbf{r}=h'a+k'b+l'o} = 0. \quad (II.28)$$

Это условие не включает температуру кристаллов, и, следовательно, периоды в статистической теории не зависят от температуры. Зависимость наблюдаемых размеров тел от температуры вытекает из термодинамики кристаллов, которая строится в главе IV.

Перейдем к рассмотрению потенциальной энергии коллективного взаимодействия атомов в кристаллическом состоянии.

В нелокальной теории эта энергия есть

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \iint K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \frac{1}{2} \int U(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{II.29})$$

Используя полученные выше выражения для молекулярного потенциала и плотности распределения, имеем

$$\varepsilon = \frac{1}{2} N \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \left[ \int_{(abc)} \bar{K}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_{\alpha}^2 \rangle \int_{(abc)} \partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \dots \right], \quad (\text{II.30})$$

где  $N$  — число ячеек в кристалле. Удерживая в каждом интеграле первые степени по температуре

$$\varepsilon = \frac{1}{2} N \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \left[ \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \sum_{h,k,l}' K(|ha + kb + lc|) + 3\theta + \dots \right],$$

замечаем, что, поскольку полное число частиц в кристалле есть

$$N \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r}, \quad (\text{II.31})$$

то на каждую частицу приходится энергия связи

$$\frac{1}{2} \left( \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \sum_{h,k,l}' K(|ha + kb + lc|) \quad (\text{II.32})$$

и тепловая энергия  $3/2\theta$ . Присоединяя к потенциальной энергии среднюю кинетическую энергию кристалла

$$T = \iint \frac{mv^2}{2} f d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \quad f = \rho(\mathbf{r}) w(v^2), \\ w(v^2) = \frac{m}{2\pi\theta} e^{-mv^2/2\theta}; \quad T = N \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} \cdot \frac{3\theta}{2}, \quad (\text{II.33})$$

получаем известное значение для теплоемкости кристаллов, при температурах, недостаточно близких к температуре плавления  $3\theta$ , в расчете на одну частицу, при постоянном числе частиц в кристалле

$$N_{\text{част}} = N_{\text{яч}} \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r} = \frac{V}{abc} \int_{(abc)} \rho d\mathbf{r}.$$

Ранее это значение теплоемкости выводилось из наличия акустического поля в кристалле и усреднения по времени кинетической и потенциальной энергии акустических осцилляторов.

В излагаемой теории та же самая величина получилась без акустического поля и без временного усреднения.

Выше рассматривалась простая кубическая решетка. Развиваемая теория остается справедливой и в приложении к сложным ячейкам. Исходное уравнение и метод решения основываются на положениях, остающихся неизменными и для других случаев. К этим положениям принадлежат следующие:

1. Наличие потенциальных ям молекулярного потенциала в узлах решетки.

2. Разбиение области интегрирования в исходном уравнении на ячейки, в каждой из которых имеется лишь один атом.

3. Использование асимптотического метода Лапласа оценки интегралов, требующего малых температур по сравнению с температурой плавления.

Эти положения остаются справедливыми в применении к кристаллам с более сложной структурой элементарных ячеек.

Рассмотрим для примера объемно-центрированную решетку. Исходным является нелинейное уравнение для молекулярного потенциала

$$U(r) = C \int_{(d^3)} \tilde{K}(r - r') e^{-U(r')/\theta} dr', \quad (\text{II.7}')$$

$$\tilde{K}(r) = \sum_{h,k,l} K(r - h d_x - k d_y - l d_z),$$

где мы опустили член с самовоздействием и приняли кубическую элементарную ячейку.

Для случая объемно-центрированной решетки разобьем появляющийся в (II.7') интеграл на 9 областей интегрирования так, чтобы на каждую область приходился один узел.

Пусть в начале координат находится узел решетки, ближайшие 8 узлов расположены в узлах ячейки, в этих узлах функция  $\tilde{K}(r)$  имеет минимум. Появляющиеся в (II.7') 9 интегралов сводятся только к двум:

$$\int_{(\Omega)} \tilde{K}(r - r') \exp[-U(r')/\theta] dr',$$

$$\int_{(\Omega)} \tilde{K}\left(r - \frac{d}{2} - r''\right) \exp[-U(r'' + d/2)/\theta] dr'', \quad (\text{II.34})$$

где вектор  $d/2$  имеет компоненты  $(d/2, d/2, d/2)$ , объем  $\Omega$  равен  $d \cdot d/2 \cdot d$  и единственные узлы находятся в первом интеграле в точке  $r' = 0$ , во втором — в точке  $r'' = 0$ .

Исходное уравнение (II.7') принимает вид

$$U(r) = C \int_{(\Omega)} \tilde{K}(r-r') \exp[-U(r')/\theta] dr' + \\ + C \int_{(\Omega)} \tilde{K}(r-r''-d/2) \cdot \exp\left[-U\left(r'' + \frac{d}{2}\right)/\theta\right] dr''. \quad (\text{II.35})$$

Оно имеет структуру, вполне аналогичную структуре уравнения для простой решетки, и решается аналогично. Разложение функций

$$K(r-r'), K(r-r''-d/2)$$

в узлах в ряд Тейлора и использование метода Лапласа оценки появляющихся интегралов приводит к решению

$$U(r) = \left(\int_{(\Omega)} \rho dr\right) \cdot \left[1 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_{\alpha}^2 \rangle \partial_{x_{\alpha}}^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \langle x_{\alpha}^2 x_{\beta}^2 \rangle (3 - 2\delta_{\alpha\beta}) \partial_{x_{\alpha}}^2 \cdot \partial_{x_{\beta}}^2 + \dots\right] \left[\tilde{K}(r) + \tilde{K}\left(r - \frac{d}{2}\right)\right], \quad (\text{II.36})$$

где

$$\langle x_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \tilde{K}(r)} \left(\int_{(\Omega)} \rho dr\right)^{-1}, \\ \langle x_{\alpha}^2 x_{\beta}^2 \rangle = \frac{\theta(1 + 2\delta_{\alpha\beta})}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \tilde{K}(r) \cdot \partial_{x_{\beta}}^2 \tilde{K}(r)} \left(\int_{(\Omega)} \rho dr\right)^{-2} \quad (\text{II.37})$$

$$(\tilde{\tilde{K}}(r) = \tilde{K}(r) + \tilde{K}(r - d/2)).$$

При этом производные в выражениях для тепловых разбросов берутся в узлах решетки.

В случае кристалла с гранецентрированной кубической решеткой интеграл в исходном нелинейном уравнении по основному периоду необходимо разбить на 13 областей, каждая из которых должна иметь один узел решетки.

Нетрудно видеть, что в этом случае мы приходим к четырем интегралам

$$\int_{(\Omega)} \tilde{K}(r-r') \exp[-U(r')/\theta] dr', \\ \int_{(\Omega)} \tilde{K}(r-r'-d_1/2 + d_3/2) \exp[-U(r'+d_2/2 + d_3/2)/\theta] dr', \\ \int_{(\Omega)} \tilde{K}\left(r-r'-\frac{d_1+d_2}{2}\right) \exp\left[-U\left(r'+\frac{d_1+d_2}{2}\right)/\theta\right] dr', \quad (\text{II.38}) \\ \int_{(\Omega)} \tilde{K}\left(r-r'-\frac{d_2+d_3}{2}\right) \exp\left[-U\left(r'+\frac{d_2+d_3}{2}\right)/\theta\right] dr',$$

где векторы сдвига начала координат определяются компонентами  $(d/2, d/2, 0)$ ,  $(d/2, 0, d/2)$ ,  $(0, d/2, d/2)$  соответственно, объем малой ячейки  $\Omega$  с одним узлом равен  $\Omega = d/2 \cdot d/2 \cdot d$ , он составляет четвертую часть объема элементарной ячейки. Таким образом, число частиц и число элементарных ячеек связаны соотношением

$$N_{\text{част}} = N_{\text{яч}} \cdot 4 \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r}.$$

Аналогично предыдущему случаю решение для молекулярного потенциала дается формулой (II.19), в которой  $\tilde{K}(\mathbf{r})$  заменяется на  $\tilde{\tilde{K}}(\mathbf{r})$ :

$$\tilde{\tilde{K}}(\mathbf{r}) = \tilde{K}(\mathbf{r}) + \sum_{s=1}^3 \tilde{K}(\mathbf{r} - \mathbf{h}_s) \quad (\text{II.39})$$

$$(\mathbf{h}_1 = (d_1 + d_2)/2, \mathbf{h}_2 = (d_1 + d_3)/2, \mathbf{h}_3 = (d_2 + d_3)/2).$$

Для тепловых разбросов имеют место вполне аналогичные выражения, с измененным значением производных в узлах решетки. Например,

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_\alpha}^2 \tilde{\tilde{K}}(\mathbf{r})} \left( \int_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right)^{-1}, \quad (\text{II.40})$$

$$\partial_{x_\alpha}^2 \tilde{\tilde{K}}(\mathbf{r}) = \partial_{x_\alpha}^2 \left[ \tilde{K}(\mathbf{r}) + \sum_{s=1}^3 \tilde{K}(\mathbf{r} - \mathbf{h}_s) \right]_0.$$

В результате во всех трех случаях: простой, объемно-центрированной и гранецентрированной решетки — молекулярный потенциал и соответственно плотность местоположения частиц отличаются между собой только видом потенциала в окрестности узлов решетки и соотношением между числом элементарных ячеек и числом частиц в кристалле.

### § 3. Анизотропия распределения вероятностей местоположения атомов в междоузлиях

Выше рассматривалось распределение плотности вероятности местоположения частиц в окрестности узла в приближении малого радиуса окрестности по сравнению с расстоянием между узлами («радиуса влияния», определяемого асимптотическим методом Лапласа). В этом приближении для простой кубической решетки получилось сферическое распределение

$$\rho(\mathbf{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho \, d\mathbf{r} \right) \cdot \prod_{\alpha=1}^3 (2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{x_\alpha^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle}\right),$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle = \langle x_3^2 \rangle, \quad a = b = c, \quad (\text{II.41})$$

При перемещении от центра узла становится заметной анизотропия распределения плотности вероятности, обусловленная различием в расположении ближайших узлов.

Анизотропия плотности  $\rho(\mathbf{r})$  видна из формул (II.19), (II.8). Потенциальная энергия взаимодействия атома с соседями, находящимися в узлах, отрицательна и монотонно убывает по модулю при приближении к середине расстояния между узлами в ячейке. В трех точках, максимально удаленных от узлов, — центре ребра, центре грани и центре куба — модуль потенциальной функции  $\bar{K}(\mathbf{r})$  убывает:

$$\left| \bar{K}\left(\frac{d}{2}, 0, 0\right) \right| > \left| \bar{K}\left(\frac{d}{2}, \frac{d}{2}, 0\right) \right| > \left| \bar{K}\left(\frac{d}{2}, \frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right) \right|, \quad (\text{II.42})$$

и поэтому ввиду зависимости  $\rho(\mathbf{r}) \sim \exp[-\bar{K}(\mathbf{r})/\theta]$  имеем

$$\rho(d/2, 0, 0) < \rho(d/2, d/2, 0) < \rho(d/2, d/2, d/2). \quad (\text{II.43})$$

Таким образом, в кристалле вероятность местоположения атома, будучи отлична от нуля во всех точках элементарной ячейки, минимальна в центре куба и возрастает с приближением к граням. На гранях она минимальна в центре грани и возрастает с приближением к ребрам, на ребрах — минимальна в центре ребер и максимальна на их концах. Изменения потенциальной энергии входят в показатель экспоненты, и поэтому градиенты анизотропного распределения велики. С увеличением температуры имеется тенденция к сглаживанию вероятности местоположений во внутренних точках элементарной ячейки.

При температуре плавления плотность вероятности расположения атомов становится пространственно-однородной величиной. Количественную детализацию анизотропного распределения плотности местоположения атомов внутри объема элементарной ячейки удастся аналитически проследить в модели кристалла с сильно пологими молекулярными силами, которые мы рассматривали в первой главе.

Отыскиваем решение исходного уравнения для распределения плотности

$$\rho(\mathbf{r}) = C \cdot \exp\left[-\frac{1}{\theta} \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\right], \quad (\text{II.44})$$

в виде тройного ряда Фурье с основным вектором обратной решетки, равным по модулю  $|a| = 2\pi/d \equiv a$ :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{h, k, l=-\infty}^{\infty} a_{hkl} \exp(ihax + ikay + ilaz). \quad (\text{II.45})$$

Привлекая

1) условие сильной «пологости» парного молекулярного потенциала взаимодействия:

$$\sigma(k) = 4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin ks}{ks} s^2 ds = 0, \quad (\text{II.46})$$

$$k = a \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

для всех  $h, k, l$ , кроме значений

$$\begin{array}{cc} 0, 0, 0, & 0, \pm 1, 0, \\ \pm 1, 0, 0, & 0, 0, \pm 1, \end{array}$$

2) очевидность наличия во взаимодействии атомов сил, удовлетворяющих условию

$$\begin{array}{cc} \sigma(0, 0, 0) > 0, & \sigma(0, \pm 1, 0) < 0, \\ \sigma(\pm 1, 0, 0) < 0, & \sigma(0, 0, \pm 1) < 0, \end{array} \quad (\text{II.47})$$

получим, что все амплитуды  $a_{hkl}$  выражаются только через амплитуды нулевой и первой гармоники с помощью функций Бесселя от мнимого аргумента:

$$a_{hkl} = \mathcal{C} I_h \left[ -\frac{2\sigma(a) a_{100}}{\theta} \right] \cdot I_k \left[ -\frac{2\sigma(a) a_{010}}{\theta} \right] \cdot I_l \left[ -\frac{2\sigma(a) a_{001}}{\theta} \right], \quad (\text{II.48})$$

$$h, k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad \mathcal{C} = C \exp[-a_{000}\sigma(0)/\theta].$$

Постоянная составляющая

$$a_{000} = \mathcal{C} I_0[-2\sigma(a) a_{100}/\theta] I_0[-2\sigma(a) a_{010}/\theta] I_0[-2\sigma(a) a_{001}/\theta] \quad (\text{II.49})$$

есть средняя плотность частиц в элементарной ячейке

$$a_{000} = \frac{1}{d^3} \int_{(d^3)} \rho dr. \quad (\text{II.50})$$

Зная амплитуды  $a_{hkl}$  и используя соотношение из теории Бесселевых функций

$$\exp(z \cos \varphi) = \sum_{m=0}^{\infty} I_m(z) 2 \cos m\varphi,$$

просуммируем (II.45). Тогда распределение плотности вероятности местоположения частиц внутри элементарной ячейки кубического кристалла выражается так:

$$\rho(r) = \left( \int_{(d^3)} \rho dr \right) \frac{1}{I_0^3[-2\sigma(a) a_{100}/\theta]} \times$$

$$\times \exp \left[ -\frac{2\sigma(a) a_{100}}{\theta} (\cos ax + \cos ay + \cos az) \right], \quad (\text{II.51})$$

при этом учтено, что в силу кубической симметрии  $a_{100} = a_{010} = a_{001}$ . Для установления связи первой гармоники  $a_{100}$  со средней плотностью вероятности  $a_{000}$  внутри ячейки необходимо выполнение равенства

$$a_{100}I_0 [-2\sigma(a)a_{100}/\theta] = a_{000}I_1 [-2\sigma(a)a_{100}/\theta].$$

Это уравнение имеет решение для  $a_{100}$ , отличное от нуля, только в том случае, если

$$\sigma(a) < 0, \quad \theta < -\frac{\sigma(a)}{d^3} \int_{(d^3)} \rho dr,$$

что совпадает с полученным ранее условием (I.56) существования кристаллического состояния при рассмотрении перехода пространственно-однородного распределения в периодическое.

Формула для распределения  $\rho(r)$  дает возможность количественно определить значения плотности во всех точках внутри элементарной ячейки. Изменение плотности в главных кристаллографических направлениях [111], [110], [100] приведено в табл. 1. За меру анизотропии в указанных направлениях взято отношение

Таблица 1

Анизотропия распределения плотности в зависимости от кристаллографических направлений и температуры

$\frac{\theta}{\theta_{пл}}$	$\frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big _{[100]}$	$\frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big _{[110]}$	$\frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big _{[111]}$
0,9988	1,097	0,8981	0,7353
0,9950	1,185	0,7947	0,5326
0,9089	1,262	0,6928	0,3802
0,9805	1,325	0,5952	0,2675
0,9700	1,371	0,5042	0,1855
0,9434	1,409	0,3476	$8,570 \cdot 10^{-2}$
0,8928	1,339	0,1813	$2,453 \cdot 10^{-2}$
0,8546	1,226	0,1113	$1,009 \cdot 10^{-2}$
0,7948	1,004	$4,997 \cdot 10^{-2}$	$2,525 \cdot 10^{-3}$
0,6978	0,6238	$1,142 \cdot 10^{-2}$	$2,093 \cdot 10^{-4}$
0,6120	0,3422	$2,305 \cdot 10^{-3}$	$1,553 \cdot 10^{-5}$
0,5400	0,1727	$4,282 \cdot 10^{-4}$	$1,062 \cdot 10^{-6}$
0,4806	$8,245 \cdot 10^{-2}$	$7,518 \cdot 10^{-5}$	$6,856 \cdot 10^{-8}$
0,4318	$3,782 \cdot 10^{-2}$	$1,269 \cdot 10^{-5}$	$4,256 \cdot 10^{-9}$
0,3574	$7,342 \cdot 10^{-3}$	$3,333 \cdot 10^{-7}$	$1,51 \cdot 10^{-11}$
0,3041	$1,327 \cdot 10^{-3}$	$8,156 \cdot 10^{-9}$	$5,01 \cdot 10^{-14}$
0,2644	$2,289 \cdot 10^{-4}$	$1,90 \cdot 10^{-10}$	$1,58 \cdot 10^{-16}$
0,2338	$3,814 \cdot 10^{-5}$	$4,29 \cdot 10^{-12}$	$4,83 \cdot 10^{-19}$
0,1897	$9,867 \cdot 10^{-7}$	$2,03 \cdot 10^{-15}$	$4,19 \cdot 10^{-24}$
0,09747	$5,87 \cdot 10^{-15}$	$2,49 \cdot 10^{-32}$	$1,06 \cdot 10^{-49}$
0,04937	$7,12 \cdot 10^{-32}$	$1,29 \cdot 10^{-66}$	$2,2 \cdot 10^{-101}$

минимального значения плотности к средней плотности в кристалле. Температура кристалла в таблице взята по отношению к температуре плавления

$$\theta_{пл} = - \frac{\sigma(a)}{d^3} \int_{(d^3)} \rho dr.$$

Таблица указывает на наличие

1) значительной анизотропии в распределении плотности частиц по направлениям главных осей; при этом получается, что

$$\frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big|_{[100]} > \frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big|_{[110]} > \frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big|_{[111]},$$

2) зависимости анизотропии от температуры,

3) «шнуров», связанных с уплотнением вероятности местоположений атомов вдоль основных кристаллографических направлений. Начиная со значений относительной температуры  $> 0,7948$  в направлении [100], минимальное значение плотности превышает среднее значение. Кроме того, из таблицы видно, что

4) аналогичный эффект уплотнения имеет место в основных кристаллографических плотностях, но он выражен значительно слабее, чем в кристаллографических осях. Это уплотнение в атомных плоскостях ни при каких температурах не превышает среднее значение плотности;

5) при относительно малых температурах плотность в междоузлиях становится очень малой величиной. Например, при  $\theta/\theta_{пл} \sim 0,05$

$$\frac{\rho_{min}}{\rho_{cp}} \Big|_{[100]} \sim 10^{-31}.$$

#### § 4. Подход к теории кривых плавления Симона

Рассмотрим изложенную ранее молекулярную теорию кристаллизации (см. главу I, § 3) с точки зрения экспериментальных кривых плавления Симона [25]. Для большинства веществ определена зависимость внешнего давления от температуры в условиях плавления — это эмпирическое уравнение Симона

$$\frac{p - p_0}{a} = \left( \frac{\theta}{\theta_0} \right)^c - 1, \tag{II.52}$$

где  $a$  и  $c$  — постоянные,  $\theta_0$  — температура плавления при атмосферном давлении  $p_0$ .

Уравнение Симона описывает линию квазиравновесного фазового перехода жидкость — кристалл,

Будем следовать работе [21] и попытаемся вывести уравнение Симона из критерия кристаллизации

$$\frac{\theta}{\rho} = -\sigma(k) = -4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin ks}{ks} s^2 ds. \quad (\text{II.53})$$

При этом воспользуемся для энергии взаимодействия формулой Ленарда — Джонса, дополняя ее требованием наличия «непроницаемой сферы», радиус которой должен зависеть от кинетической энергии частиц при их сближении:

$$K(r) = \begin{cases} 4\epsilon [(a_0/r)^n - (a_0/r)^m], & r \geq r_0, \\ \infty, & r < r_0; \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

$r_0$  находится из условия

$$4\epsilon \left(\frac{a_0}{r_0}\right)^n = \frac{\int_{(\infty)}^{\infty} \frac{mv^2}{2} f dv}{\int_{(\infty)}^{\infty} f dv} = \frac{3\theta}{2}. \quad (\text{II.55})$$

При вычислении интеграла (II.53) используем следующие приближения.

1. Будем учитывать только силы отталкивания, силы притяжения введем позднее как дополнение.

2. Вместо интегрирования от радиуса непроницаемости  $r_0$  до  $\infty$  будем интегрировать от нуля, вводя обрезывающий фактор, приближенно передающий наличие непроницаемой сферы радиусом  $r_0$ :

$$\exp[-4\epsilon (a_0/r)^n/\theta].$$

Тогда выражение (II.53) для  $\sigma(k)$  примет вид

$$\sigma(k) = 4\pi \int_0^{\infty} 4\epsilon \left(\frac{a_0}{r}\right)^n \exp\left[-\frac{4\epsilon}{\theta} \left(\frac{a_0}{r}\right)^n\right] \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr. \quad (\text{II.56})$$

Примерная зависимость  $\sigma(k)$ , определяемая этим выражением, показана на рис. 3.

Переходя к безразмерной переменной

$$r \rightarrow r' = \frac{r}{a_0} \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1/n},$$

получим

$$\sigma(k) = 16\pi\epsilon a_0^3 \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1-3/n} \int_0^{\infty} \frac{1}{r'^n} \exp\left(-\frac{1}{r'^n}\right) r'^2 \frac{\sin [ka_0 r' (4\epsilon/\theta)^{1/n}]}{ka_0 r' (4\epsilon/\theta)^{1/n}} dr'. \quad (\text{II.57})$$

Для достаточно высоких температур синус можно разложить в ряд, и после интегрирования будем иметь, ограничиваясь четырьмя первыми членами разложения:

$$\sigma(k) = 16\pi\epsilon a_0^3 \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1-3/n} \left[ I_1 - \frac{1}{3!} k^2 a_0^2 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{2/n} I_2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{5!} k^4 a_0^4 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{4/n} I_3 - \frac{1}{7!} k^6 a_0^6 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{6/n} I_4 \right], \quad (\text{II.58})$$

где

$$I_p = \frac{1}{n} \Gamma\left(\frac{n-2p-1}{n}\right).$$

Начало процесса кристаллизации определяется одновременным соблюдением условий:

- 1)  $\sigma(k_0) < 0,$
- 2)  $\frac{\theta V}{N} = -\sigma(k_0),$  (II.59)
- 3)  $\left. \frac{\partial \sigma(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} = 0;$

при этом учтено, что  $\rho = N/V$ .

Определим  $k_0$  из условия 3), и используя вышеуказанное представление  $\sigma(k)$ , имеем

$$k_0^2 a_0^2 = 10 \left[ \Gamma\left(\frac{n-5}{n}\right) / \Gamma\left(\frac{n-7}{n}\right) \right] \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{2/n}. \quad (\text{II.60})$$

Подстановка этого выражения в формулу для  $\sigma(k)$  при  $k = k_0$  дает

$$\sigma(k_0) = -\frac{16\pi\epsilon a_0^3 b}{n} \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1-3/n}, \quad (\text{II.61})$$

где

$$b = \frac{5}{6} \Gamma^2\left(\frac{n-5}{n}\right) / \Gamma\left(\frac{n-7}{n}\right) + \\ + \frac{25}{126} \left[ \Gamma^3\left(\frac{n-5}{n}\right) / \Gamma^3\left(\frac{n-7}{n}\right) \right] \Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right) - \Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right).$$

Из критерия кристаллизации (II.53) находим выражение предельного объема

$$V = \frac{N}{\theta} \frac{16\pi\epsilon a_0^3 b}{n} \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1-3/n}. \quad (\text{II.62})$$

Для получения линии фазового перехода в переменных  $p$  и  $\theta$  необходимо воспользоваться уравнением состояния. Для этой цели воспользуемся модификацией метода Гиббса применительно к нелокальной теории, не вводя понятий, связанных с локализацией и целочисленностью системы частиц.

Определим свободную энергию  $\Psi$ ,<sup>1</sup>приходящуюся на одну частицу, с помощью уравнения

$$\int_{(\infty)} \int_V \exp\left(\frac{\Psi - H}{\theta}\right) dr dp = 1, \quad (\text{II.63})$$

где

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r), \quad (\text{II.64})$$

$$U(r) = \int K(|r - r'|) \exp\left[-\frac{K(|r - r'|)}{\theta}\right] \rho(r') dr' = \frac{N\sigma(0)}{V}.$$

Представление потенциальной энергии в виде функционала (II.64) отличает эту статистическую термодинамику от классической теории. Из исходной формулы для нормировки получаем

$$\Psi = N\psi = -N\theta \ln \left\{ V (2\pi m\theta)^{3/2} \exp\left[-\frac{N\sigma(0)}{2\theta V}\right] \right\} \quad (\text{II.65})$$

и

$$p = -\frac{\partial\Psi}{\partial V} = \frac{N\theta}{V} + \frac{1}{2} \frac{N^2\sigma(0)}{V^2} \quad (\text{II.66})$$

(при интегрировании по  $r$  перед  $U(r)$  в гамильтониане нужно писать множитель  $1/2$ ).

Подставляя ранее полученное выражение для предельного объема в уравнение состояния, а также формулу для  $\sigma(k)$  при  $k=0$  и добавляя поправку  $a$  на силы притяжения частиц, получим

$$p = \frac{1}{32\pi a_0^3 b^2} \left[ \Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right) + 2b \right] n\theta_0^2 \left(\frac{4\epsilon}{\theta_0}\right)^{1-3/n} \left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^{1+3/n} - a. \quad (\text{II.67})$$

Сравнивая это уравнение с эмпирической кривой Симона, получим при  $p \gg p_0$ ,  $c = 1 + 3/n$

$$a = \frac{1}{32\pi a_0^3 b^2} \left[ \Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right) + 2b \right] n\theta_0^2 \left(\frac{4\epsilon}{\theta_0}\right)^{1-3/n}. \quad (\text{II.68})$$

Заметим, что коэффициент пропорциональности между  $p$  и  $\theta^{1+3/n}$  не зависит от температуры  $\theta_0$ , которая введена для удобства сравнения с экспериментом. Так как для благородных газов  $n = 10 \div 12$ , а экспериментальное значение  $c \sim 1,5 \div 1,6$ , то для константы  $c$  мы имеем довольно хорошее согласие с опытом. Подставляя в выражение для  $a$  известное значение констант  $\theta_0$

и  $\epsilon$  для случая  $n = 12$ , можно провести сравнение с экспериментальными результатами [27], приведенное в табл. 2.

Таблица 2

Вещество	Ag	Kr	Xe	Ne	N <sub>2</sub>
$a_{\text{теор}}, \text{кГ/см}^2$	2644	2974	3053	1308	1571
$a_{\text{эксп}}, \text{кГ/см}^2$	2087	2345	2576	1024	1586

Таким образом, теоретический критерий кристаллизации правильно описывает эмпирические кривые плавления Симона.

### § 1. Существование и свойства нитевидных структур

В этой главе излагается доказательство того, что выведенная в предыдущей главе троякопериодическая структура кристаллов является только одним из его состояний. Имеются другие решения статистических уравнений, равноправные с троякопериодическим. Эти решения представляют структуры, в которых атомы располагаются периодически только в одном или двух измерениях, а в остальных имеет место пространственно-однородное распределение. Направление «нитей» и «пластин» совпадает с направлением кристаллографических осей и плоскостей, отличающихся максимальной заселенностью атомов. В «нитеях» и «плоскостях», в отличие от «решеточно-точечного» состояния кристалла, атомы расположены с одинаковой вероятностью. Это указывает на существование нового типа структур, где «непрерывность» не является следствием усреднений, а обусловлена первичностью функций распределения в теории.

Выясняются свойства «нитевидных» и «пластинчатых» структур — эффективные толщины, размеры элементарных ячеек, энергия связи.

Поскольку, как правило, внутренняя энергия «нитевидных» и «пластинчатых» структур оказывается по величине больше внутренней энергии троякопериодического кристалла, то новые состояния необходимо рассматривать как состояния возбуждения кристалла. Таким образом, кристалл по меньшей мере может находиться в трех состояниях — «решеточно-точечном», «решеточно-нитевидном», «решеточно-пластинчатом».

Несмотря на нелинейность исходных уравнений, описывающих кристалл, все три состояния могут одновременно сосуществовать при одной и той же температуре, при условии пространственной разобщенности тех областей, в которых они имеют место.

Нитевидные и пластинчатые структуры, как и кристаллические, являются равноправными решениями одного и того же уравнения с одним и тем же молекулярным взаимодействием между атомами.

Исходя из уравнения для молекулярного потенциала (I.45), поставим задачу отыскания решений, характеризующихся равномерным распределением потенциала  $U(r)$  (и плотности  $\rho(r)$ ,

которая задается формулой (I.46)) вдоль основных кристаллографических осей.

Направляя координатную ось  $x_3 \equiv x$  вдоль выбранного кристаллографического направления и полагая, что

$$\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial p(\mathbf{r})}{\partial x} = 0, \quad U(\mathbf{r}) \equiv \bar{U}(\mathbf{r}_\perp), \quad (\text{III.1})$$

приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \bar{U}(\mathbf{r}_\perp) &= \bar{C} \int \bar{K}(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) e^{-\bar{U}(\mathbf{r}_\perp)^{\theta}} d\mathbf{r}'_\perp, \\ \bar{K}(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) &= \frac{1}{d} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) dx', \quad \bar{C} = Cd, \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

где  $d$  — период решетки исходного кристалла в направлении оси  $x$ .

Уравнение для нитевидных структур отличается от исходного уравнения для трехмерного случая не только уменьшением числа измерений, но и видом ядра интегрального уравнения. Если соблюдаются все условия для существования периодических решений при малых  $\theta$  для нового ядра, то и решения будут вполне аналогичны. К числу этих условий относятся:

1) наличие потенциальной ямы для функции  $\bar{U}(\mathbf{r}_\perp)$  внутри каждой плоской ячейки, обусловленной действием всех остальных нитей на данную;

2) условия, при реализации которых можно пренебречь «самовоздействием» по сравнению с членами взаимодействия между нитями.

При выполнении этих требований решение для нитевидных структур получается вполне аналогично трехмерному случаю.

Используя условие периодичности  $\bar{U}(\mathbf{r}_\perp)$ , исходное уравнение (III.2) можно записать так:

$$\begin{aligned} \bar{U}(\mathbf{r}_\perp) &= \bar{C} \int_{(\bar{a}\bar{b}\bar{c})} \left( \sum_{h,k} \bar{K}(|\mathbf{r}_\perp - h\mathbf{a} - k\mathbf{b} - \mathbf{r}'_\perp|) \right) e^{-\bar{U}(\mathbf{r}_\perp)^{\theta}} d\mathbf{r}'_\perp + \\ &+ \delta\bar{U}_s(\mathbf{r}_\perp), \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

$$\delta\bar{U}_s(\mathbf{r}_\perp) = \bar{C} \int_{(\bar{a}\bar{b}\bar{c})} \bar{K}(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) e^{-\bar{U}(\mathbf{r}_\perp)^{\theta}} d\mathbf{r}'_\perp;$$

ядро в первом интеграле будем обозначать в дальнейшем через  $\widetilde{\bar{K}}(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp)$ .

Разлагая ядро  $\widetilde{\bar{K}}(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp)$  в ряд Тейлора относительно переменной  $\mathbf{r}'_\perp$ , учитывая симметрию  $\rho(\mathbf{r}_\perp)$  относительно преобразования  $x_{a\perp} \rightarrow -x_{a\perp}$  и используя для оценки интегралов при достаточно малых температурах асимптотический метод Лапласа, при-

ходим к решению. Для молекулярного потенциала, теплового разброса и плотности вероятности местоположения атомов получаем

$$\bar{U}(r_{\perp}) = \left( \int_{(\bar{abc})} \rho(r_{\perp}) dr_{\perp} \right) \left[ 1 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha=1}^2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle \partial_{x_{\alpha}}^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\alpha=1}^2 \langle x_{\alpha}^2 x_{\beta}^2 \rangle (3 - 2\delta_{\alpha\beta}) \partial_{x_{\alpha}}^2 \partial_{x_{\beta}}^2 + \dots \right] \bar{K}(r_{\perp}), \quad (\text{III.4})$$

$$\langle x_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0} \left[ \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right]^{-1}, \\ \langle x_{\alpha}^2 x_{\beta}^2 \rangle = \frac{\theta^2 (1 + 2\delta_{\alpha\beta})}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0 \partial_{x_{\beta}}^2 \bar{K}|_0} \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right)^{-2},$$

$$\bar{\rho}(r_{\perp}) = \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \frac{1}{d} \prod_{\alpha=1}^2 (2\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x_{\alpha}^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle}\right),$$

$\bar{\rho}(r_{\perp})$  — объемная плотность вероятности местоположения частиц. Учитывая члены до второго порядка по температуре включительно, получим

$$\langle x_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0} \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{\theta}{2} \left[ \frac{\partial_{x_{\alpha}}^4 \bar{K}|_0}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0 \partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0} \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right)^{-1} \right] + \dots \right\}. \quad (\text{III.5})$$

Подсчитывая энергию взаимодействия частиц в нитевидных структурах по формуле

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} \int_{(\bar{abc})} \bar{U}(r_{\perp}) \bar{\rho}(r_{\perp}) dr = \frac{1}{2} N \int_{(\bar{abc})} \bar{U}(r_{\perp}) \bar{\rho}(r_{\perp}) dr, \quad (\text{III.6})$$

где  $N$  — число ячеек, получим с точностью до членов, содержащих квадрат температуры:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} N \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \left[ \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \sum_{h, k} \bar{K}(|ha + kb|) + 2\theta - \right. \\ \left. - \frac{\theta^2}{8} \left( \int_{(\bar{abc})} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (-1)^{\alpha+\beta} \frac{\partial_{x_{\alpha}}^2 \partial_{x_{\beta}}^2 \bar{K}|_0}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K}|_0 \partial_{x_{\beta}}^2 \bar{K}|_0} + \dots \right]. \quad (\text{III.7})$$

Присоединяя сюда кинетическую энергию частиц

$$\bar{T} = \iiint \frac{mv^2}{2} f dr dv = N \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right) \frac{3\theta}{2},$$

находим в приближении линейной зависимости энергии от температуры естественное значение теплоемкости, приходящейся на одну частицу, в случае нитевидных структур ( $^{5/2}k$ ).

Теплоемкость при высоких температурах будет увеличиваться с ростом температуры, если

$$\sum_{\alpha, \beta=1}^2 (-1)^{\alpha+\beta} \frac{\partial_{x_{\alpha}}^2 \partial_{x_{\beta}}^2 \bar{K} |_{\alpha}}{\partial_{x_{\alpha}}^2 \bar{K} |_{\alpha} \partial_{x_{\beta}}^2 \bar{K} |_{\alpha}} < 0. \quad (\text{III.8})$$

Для двух типичных видов взаимодействия (I.12) ядра, входящие в исходное интегральное уравнение

$$\bar{K}(|r_{\perp} - r'_{\perp}|) = \frac{1}{d} \int K(|r - r'|) dr',$$

имеют вид

$$\bar{K}_I(|r_{\perp} - r'_{\perp}|) = \sum_{s \geq 1} (-1)^s \frac{2G_s}{d} K_0(\kappa_s |r_{\perp} - r'_{\perp}|), \quad (\text{III.9})$$

$$\bar{K}_{II}(|r_{\perp} - r'_{\perp}|) = 2\pi\mu \frac{r_0}{d} \left[ \frac{63}{128} \left( \frac{r_0}{|r_{\perp} - r'_{\perp}|} \right)^{11} - \frac{3}{4} \left( \frac{r_0}{|r_{\perp} - r'_{\perp}|} \right)^5 \right],$$

где  $K_0(\kappa |r_{\perp} - r'_{\perp}|)$  — функция Макдональда. Во втором случае мы исходили из потенциала Ленарда — Джонса для степеней 12 и 6.

Вводим для степенного вида взаимодействий по аналогии с трехмерным случаем представление о кольцевых слоях. Тогда

$$\begin{aligned} \bar{K}_{II}(\bar{r}_{II}) &= 2\pi\mu \frac{r_0}{d} \left[ \frac{63}{128} \left( \frac{r_0}{r_{II}} \right)^{11} \bar{Z}_{11} - \frac{3}{4} \left( \frac{r_0}{r_{II}} \right)^5 \bar{Z}_5 \right], \\ \bar{Z}_n &= \sum_{m \geq 1} \frac{\bar{z}_m}{\bar{\beta}_m^n}, \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

где  $\bar{Z}_n$  — эффективное число нитей,  $\bar{z}_m$  — реальное число нитей в слое с радиусом на плоскости, равным  $\bar{\beta}_m r_{II}$ ,  $\bar{\beta}_m$  — структурные коэффициенты, и общий вид  $\bar{K}_{II}(r_{II})$  гарантирует наличие потенциальной ямы.

Для первого случая  $\bar{K}_I(\bar{r}_I)$  легко заключить, что потенциальная яма имеет место без дополнительных условий, если таковая существует в случае «решеточно-точечного» состояния.

Из условий минимума находим характерное расстояние между нитями

$$(\bar{r}_I, \bar{r}_{II}) = \left( \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1} \ln \frac{G_2}{G_1} \sqrt{\frac{\kappa_2}{\kappa_1}}, r_0 \left( \frac{231}{160} \frac{\bar{Z}_{11}}{\bar{Z}_5} \right)^{1/6} \right). \quad (\text{III.11})$$

Сравнение с трехмерным случаем указывает, что в обоих случаях расстояние между соседними нитями меньше, чем постоянная решетки в трехмерном кристалле, это указывает на уплотнение среды при переходе решеточно-точечного состояния в решеточно-нитевидное.

Отношение размеров длин элементарных ячеек есть

$$\frac{r_{II}}{\bar{r}_{II}} = \left( 2 \frac{Z_{12}}{\bar{Z}_6} \frac{160}{231} \frac{\bar{Z}_5}{\bar{Z}_{11}} \right)^{1/6}, \quad (\text{III.12})$$

что составляет для кубической решетки приблизительно уменьшение на четыре сотых Å; это одно из указаний для экспериментального выявления нитевидных структур.

Уменьшение расстояния между нитями, при сохранении суммарной вероятности местопребывания атома в элементарной ячейке, указывает на уплотнение среды при переходе решеточно-точечного состояния в решеточно-нитевидное.

Обозначая  $\rho = 1/r^3$ ,  $\bar{\rho} = 1/\bar{r}^2 r$ ,  $\Delta\bar{\rho} = \bar{\rho} - \rho$ , получаем

$$\begin{aligned} \left( \frac{\Delta\bar{\rho}}{\rho} \right)_I &= \left[ \ln \left( \frac{G_2}{G_1} \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) / \ln \left( \frac{G_2}{G_1} \sqrt{\frac{\kappa_2}{\kappa_1}} \right) \right]^2 - 1 > 0, \\ \left( \frac{\Delta\bar{\rho}}{\rho} \right)_{II} &= \left( \frac{320}{231} Z_{12} Z_6^{-1} \bar{Z}_5 \bar{Z}_{11}^{-1} \right)^{1/6} - 1 > 0. \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

Для простой решетки  $\Delta\bar{\rho}/\rho$  приблизительно равно 8%.

Подсчитаем изменение энергии связи в нитевидных структурах по сравнению с кристаллическими. Первый член в выражении потенциальной энергии нитевидных структур (для первого из двух видов взаимодействий (I.12) удержим только влияние ближайших соседей) есть

$$\bar{\varepsilon}_I^0 = -\frac{1}{2} N \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(r_\perp) dr \right) \frac{G_1}{d} e^{-\kappa_1 \bar{r}_I \bar{z}_\perp} \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa_1 \bar{r}_I}} \left( 1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right). \quad (\text{III.14})$$

Сравнение с аналогичным выражением для кристалла дает

$$\left| \frac{\bar{\varepsilon}_I^0}{\varepsilon_I^0} \right| = \left( \frac{\bar{z}_\perp \sqrt{2\pi}}{z} \right) \frac{r_I}{d} \left( \frac{F-1}{\ln \frac{G_2}{G_1} \sqrt{F}} \right)^{1/2} e^{\ln[\sqrt{F}/(F-1)]}, \quad F = \frac{\kappa_2}{\kappa_1} > 1. \quad (\text{III.15})$$

Отсюда заключаем, что при достаточной близости параметра  $F$  к 1

$$|\bar{\varepsilon}_I^0/\varepsilon_I^0| < 1.$$

Таким образом, появление нитевидных структур связано с увеличением энергии в системе, где они возникают.

Для второго случая взаимодействий (I.12)

$$\bar{\epsilon}_{II}^0 = -Nu \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(r_{\perp}) dr \right)^2 \frac{240\pi}{847} \bar{Z}_5^2 \bar{Z}_{11}^{-1} \left( \frac{231}{320} \bar{Z}_{11} \bar{Z}_{12}^{-1} \bar{Z}_6 \bar{Z}_5^{-1} \right)^{1/4}. \quad (\text{III.16})$$

Сравнение с

$$\epsilon_{II}^0 = -\frac{1}{2} Nu \left( \int_{(abc)} \rho(r_{\perp}) dr \right) \frac{Z_6}{Z_{12}}$$

показывает, что отношение  $|\bar{\epsilon}_{II}^0/\epsilon_{II}^0|$  составляет около 80%. В этом случае появление нитевидных структур также связано с увеличением энергии. Заметим, что в первом случае имеет место особое поведение энергии связи: при достаточно большом значении параметра  $F$  возникает изменение последовательности энергетических состояний.

Выше мы опускали член с самовоздействием

$$\delta \bar{U}_s(r_{\perp}) = \bar{C} \int_{(abc)} \bar{K}(|r_{\perp} - r'_{\perp}|) \bar{\rho}(r'_{\perp}) dr'_{\perp}.$$

Для того чтобы оценить его величину, разложим функцию  $\bar{\rho}(r'_{\perp})$  в окрестности  $r_{\perp}$  в ряд Тейлора, получаем

$$\delta \bar{U}_s(r_{\perp}) = a_0^2 \left[ \alpha_1 \bar{\rho}(r_{\perp}) + \frac{1}{2} \alpha_2 a_0^2 \Delta_{\perp} \bar{\rho}(r_{\perp}) + \dots \right], \quad (\text{III.17})$$

$$\alpha_1 = 4\pi \frac{2G}{d} \int_{r_0/a_0}^{\infty} t K_0(t) dt, \quad \alpha_2 = 4\pi \frac{2G}{d} \int_{r_0/a_0}^{\infty} t^3 K_0(t) dt, \dots$$

Здесь мы учли, что для малых расстояний

$$\bar{K}(s) = \begin{cases} \frac{2G}{d} K_0(s), & s \geq r_{0\perp}, \\ \infty, & s < r_{0\perp}, \end{cases} \quad (\text{III.18})$$

где  $r_{0\perp}$  определяется из условия

$$\frac{2G}{d} K_0(\chi r_{0\perp}) = \frac{\int_{(\infty)}^{\infty} \frac{1}{2} m v^2 f dv}{\int_{(\infty)}^{\infty} f dv} = 0, \quad (\text{III.19})$$

Коэффициенты  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  экспоненциально зависят от отношения  $r_{0\perp}/a_0$ , поэтому в случае

$$r_{0\perp} \gg a_0$$

член самовоздействия оказывается экспоненциально малым.

Оценим роль самовоздействия в противоположном случае

$$\frac{r_{0\perp}}{a_0} \ll 1.$$

Сравнивая выражение самовоздействия с энергией взаимодействия одной нити с ближайшими соседями

$$\left| \frac{\delta U_s}{\sum_{n,k} \bar{K}(|r_{\perp} - ha - kb|)} \right| \approx \frac{a_0^2}{\langle x_x^2 \rangle} \eta, \quad (III.20)$$

$$\eta = \frac{2}{z_{\perp}} \frac{G}{G_1} \cdot \sqrt{\frac{\kappa_1 \Gamma}{2\pi}} \cdot \frac{e^{\kappa_1 \Gamma}}{1 - \kappa_1/\kappa_2},$$

закljučаем, что если радиус сил отталкивания достаточно мал по сравнению с линейными размерами области теплового разброса, то и в этом случае самовоздействием можно пренебречь, так как  $\eta \sim 1 \div 10$ .

## § 2: Существование и свойства пластинчатых структур

Перейдем к рассмотрению решений в виде решеточно-пластинчатых структур.

Для существования подобных решений требуем независимости молекулярного потенциала от  $x_1, x_2$ :

$$\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x_1} = \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x_2} = 0, \quad U(\mathbf{r}) \equiv \bar{U}(x), \quad x_3 \equiv x. \quad (III.21)$$

Тогда основное уравнение (I.45) приобретает вид

$$\bar{U}(x) = \bar{C} \int \bar{K}(|x - x'|) e^{-\bar{V}(x')/\theta} dx', \quad (III.22)$$

где

$$\bar{K}(|x - x'|) = \frac{1}{ab} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) dx_1 dx_2, \quad \bar{C} = Cab, \quad (III.23)$$

здесь  $a$  и  $b$  — размеры элементарной ячейки исходного кристалла в направлении осей  $x_1$  и  $x_2$ . Если для нового ядра также соблюдается условие наличия потенциальной ямы и сохраняется существование условий малости члена с самовоздействием, то решение таково:

$$\bar{U}(x) = \left( \int_{(ab\bar{C})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \left[ 1 + \frac{1}{2!} \langle x^2 \rangle \partial_x^2 + \frac{1}{4!} \langle x^4 \rangle \partial_x^4 + \dots \right] \bar{\bar{K}}(x), \quad (III.24)$$

$$\bar{\bar{K}}(x) = \sum_l \bar{K}(|x - lc|),$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \\ &= \frac{\theta}{\partial_x^2 \bar{K} |_0} \left[ \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right]^{-1} \cdot \left[ 1 - \frac{\theta}{2} \left( \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right)^{-1} \frac{\partial_x^4 \bar{K}}{(\partial_x^2 \bar{K} |_0)^2} + \dots \right], \\ \langle x^4 \rangle &= \frac{3\theta^2}{(\partial_x^2 \bar{K} |_0)^2} \left( \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right)^{-2}, \\ \bar{\rho}(x) &= \left( \int_{(ab\bar{e})} \rho(x) d\mathbf{r} \right) \cdot \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} e^{-x^2/2 \langle x^2 \rangle}. \end{aligned}$$

Для энергии взаимодействия частиц в пластинчатых структурах получаем

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{2} \int \bar{U}(x) \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{2} N \left( \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \cdot \left[ \int_{(ab\bar{e})} \bar{K}(x) \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} + \frac{\langle x^2 \rangle}{2!} \int_{(ab\bar{e})} \partial_x^2 \bar{K}(x) \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\langle x^4 \rangle}{4!} \int_{(ab\bar{e})} \partial_x^4 \bar{K}(x) \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} + \dots \right]. \quad (\text{III.25}) \end{aligned}$$

Вычисление с точностью до членов, квадратичных в температуре, дает

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{1}{2} N \left( \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \left[ \left( \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \sum_l \bar{K}(l|\bar{l}c|) + \right. \\ &\quad \left. + \theta - \frac{3\theta^2}{8} \frac{\partial_x^4 \bar{K} |_0}{(\partial_x^2 \bar{K} |_0)^2 \int_{(ab\bar{e})} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r}} + \dots \right]. \quad (\text{III.26}) \end{aligned}$$

Добавляя к потенциальной энергии среднюю кинетическую

$$\bar{T} = \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} fd\bar{v} / \int_{(\infty)} fd\bar{v} = \frac{3}{2} \theta,$$

находим, что теплоемкость определяется в соответствии с числом степеней свободы при наличии пластинчатых структур.

Ввиду того, что энергия в потенциальных ямах растет медленнее параболы, имеет место неравенство

$$\partial^4 \bar{K} |_0 < 0,$$

поэтому теория приводит к возрастанию теплоемкости с увеличением температуры, если учитывать в выражении для энергии член, зависящий от квадрата температуры.

Определим другие параметры пластинчатых структур. Для прежних двух видов взаимодействий получаем, после вторичного

интегрирования по  $x_1$  и  $x_2$ :

$$\bar{K}_I(|x - x'|) = \frac{2\pi}{ab} \sum_{s \geq 1} (-1)^s \frac{G_s}{\kappa_s} e^{-\kappa_s |x - x'|},$$

$$\bar{K}_{II}(|x - x'|) = 4\pi i \frac{r_0^2}{ab} \left[ \frac{63}{315} \left( \frac{r_0}{|x - x'|} \right)^{10} - \frac{1}{2} \left( \frac{r_0}{|x - x'|} \right)^4 \right]. \quad (\text{III.27})$$

Полагая

$$\frac{\partial}{\partial x} \sum_l' \bar{K}(|x - l\bar{c}|) = 0,$$

определим расстояние между пластинами. Для первого случая взаимодействий (I.12) находим

$$(\bar{r}_I, \bar{r}_I, r_I) = \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1} \left( \ln \frac{G_2}{G_1}, \ln \frac{G_2}{G_1} \sqrt{\frac{\kappa_2}{\kappa_1}}, \ln \frac{G_2}{G_1} \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right). \quad (\text{III.28})$$

Для второго случая (I.12), вводя эффективное число соседей для пластин

$$\sum_{m \geq 1} \frac{2}{m^p} = \bar{Z}_p,$$

находим

$$(\bar{r}_{II}, \bar{r}_{II}, r_{II}) = r_0 \left[ \left( \frac{\bar{Z}_{10}}{\bar{Z}_4} \right)^{1/4}, \left( \frac{231 \bar{Z}_{11}}{160 \bar{Z}_5} \right)^{1/5}, \left( 2 \frac{Z_{12}}{Z_6} \right)^{1/6} \right]. \quad (\text{III.29})$$

Таким образом, в обоих случаях происходит дальнейшее уменьшение характерного периода структур. Укорочение периода приводит и для пластинчатых структур к увеличению средней плотности среды. Полагая  $\rho = 1/r^3$ ,  $\bar{\rho} = 1/r^2 \bar{r}$ ,  $\Delta \bar{\rho} = \bar{\rho} - \rho$ , находим

$$\begin{aligned} \left( \frac{\Delta \bar{\rho}}{\rho} \right)_I &= \ln \left( \frac{G_2}{G_1} \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) / \ln \frac{G_2}{G_1} - 1 > 0, \\ \left( \frac{\Delta \bar{\rho}}{\rho} \right)_{II} &= \frac{64}{27} Z_{12} Z_6^{-1} \bar{Z}_{10} \bar{Z}_4^{-1} - 1 > 0. \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

В условиях второго вида взаимодействий  $\Delta \bar{\rho} / \rho \sim 10\%$ .

При рассмотрении пластинчатых структур мы опустили член с самовоздействием

$$\delta \bar{U}_s(x) = \int_{(ab\bar{c})} \bar{K}(|x - x'|) \bar{\rho}(x') dx'. \quad (\text{III.34})$$

И в этом случае, как и ранее, его можно представить в виде

$$\delta \bar{U}_s(x) = a_0^2 \left[ \alpha_1 \bar{\rho}(x) + \frac{1}{2} \alpha_2 a_0^2 \frac{d^2}{dx^2} \bar{\rho}(x) + \dots \right], \quad (\text{III.32})$$

$$\alpha_1 = 4\pi \frac{2\pi}{ab} \frac{G}{\kappa} \int_{r_0/a_0}^{\infty} e^{-x} dx, \quad \alpha_2 = 4\pi \frac{2\pi}{ab} \frac{G}{\kappa} \int_{r_0/a_0}^{\infty} x^2 e^{-x} dx, \dots$$

Конкретизируя парное взаимодействие атомов в пластинах по формуле

$$\bar{K}(s) = \begin{cases} \frac{2\pi}{ab} \frac{G}{\kappa} e^{-\kappa s}, & s \geq r_0, \\ \infty, & s < r_0, \end{cases} \quad (\text{III.33})$$

$$\frac{2\pi}{ab} \frac{G}{\kappa} e^{-\kappa r_0} = \frac{\theta}{2}, \quad \kappa^{-1} = a_0,$$

получаем, что аналогично трехмерному и двумерному случаям, коэффициенты  $\alpha_1, \alpha_2, \dots$  экспоненциально малы, если  $r_0 \gg a_0$ .

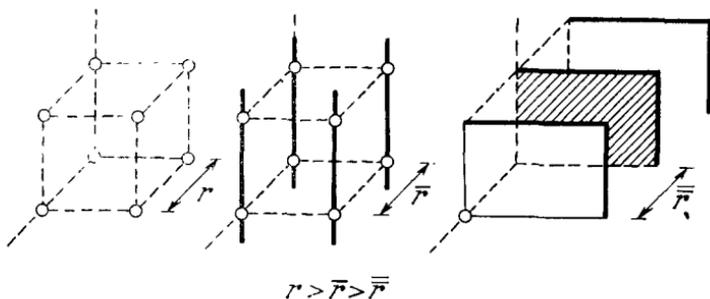


Рис. 4.

В случае  $r_0/a_0 \ll 1$ , сравнивая член самовоздействия со взаимодействием частиц между ближайшими соседями

$$\left| \frac{\delta \bar{U}_s}{\bar{K}_I(|x - \bar{c}|) + \bar{K}_I(|x + \bar{c}|)} \right| \approx \frac{G}{G_1} \frac{a_0^2 \kappa_1}{\langle x^2 \rangle^{1/2}} \left( 1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right)^{\frac{\kappa_1}{\kappa_2 - \kappa_1}} \ln \frac{r_2}{G_1}, \quad (\text{III.34})$$

закключаем, что при достаточно малом значении параметра  $a_0$  в сравнении с величиной теплового разброса самовоздействием можно пренебречь.

Сравним энергию связи всех трех состояний кристалла — решеточно-точечного, решеточно-нитевидного и решеточно-пластинчатого.

Для последнего из перечисленных состояний, на основании полученной формулы для энергии  $\bar{E}$ , получим, если в (I.12) воспользоваться первой формулой:

$$\epsilon_I = -\frac{1}{2} N \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} dr \right) - \frac{G_1}{r_I} e^{-\kappa_1 r_I} \bar{z}_\perp \frac{r_I^2}{ab} \frac{2\pi}{\kappa_1 r_I} e^{-\kappa_1(\bar{r}_I - r_I)} \left( 1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right). \quad (\text{III.35})$$

Сравнивая (III.35) с аналогичной формулой для нитевидных структур, получаем

$$\left| \frac{\bar{\varepsilon}_I}{\varepsilon_I} \right| = \sqrt{2\pi} \frac{\bar{z}_\perp}{z_\perp} \frac{r_{\Gamma d}}{ab} \left[ (F-1) \ln \left( \frac{G_2}{G_1} \sqrt{F} \right) / \ln^2 \left( \frac{G_2}{G_1} F \right) \right]^{1/2} \exp \frac{\ln \sqrt{F}}{F-1} \quad (\text{III.36})$$

$$(F = \kappa_2/\kappa_1 > 1).$$

Заметим, что при достаточно близких значениях  $F$  к 1  $|\bar{\varepsilon}_I/\varepsilon_I| < 1$ . Для второго случая энергии взаимодействия в (I.12) имеем

$$\bar{\varepsilon}_{II} = - (2Nu) \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) dr \right) \left( \frac{3\pi}{10} \bar{Z}_4 \left[ \frac{1}{2} Z_6 Z_{12}^{-1} \bar{Z}_4^2 \bar{Z}_{10}^{-2} \right]^{1/2} \right). \quad (\text{III.37})$$

Соотношение энергий всех состояний таково:

$$\varepsilon_{II}: \bar{\varepsilon}_{II}: \bar{\bar{\varepsilon}}_{II} = (-2,84) : (-2,71) : (-1,89); \quad (\text{III.38})$$

при этом учитывалось, что для кубической решетки

$$(Z_{2m}; \bar{Z}_{2m-1}; \bar{Z}_{2m-2}) = (8,389; 5,091; 2,165); \\ (6,202; 4,09; 2,002), \quad m = 3,6. \quad (\text{III.39})$$

В итоге рассмотрения нитевидных и пластинчатых структур приходим к следующим результатам:

1. Нитевидные и пластинчатые структуры, как и кристаллические, являются равноправными решениями одного и того же исходного уравнения с одним и тем же молекулярным взаимодействием между частицами.

2. Новые структуры требуют большей внутренней энергии и большей средней плотности для своего существования. Эти свойства обосновывают заключение об этих структурах как о состояниях возбуждения кристалла.

3. Несмотря на нелинейность исходных уравнений, реализуется принцип суперпозиции частных решений в том смысле, что все три состояния могут одновременно сосуществовать при условии пространственной разобщенности тех областей, в которых они имеют место.

4. Для взаимодействий в виде экранированных потенциалов и при специальном значении параметров (достаточно большие значения в формулах для энергий взаимодействия в нитевидных и пластинчатых структурах) возникает изменение энергетической последовательности состояний. В этом случае появление нитевидных структур не требует предварительного существования троякопериодического кристалла, поэтому в особых случаях новые структуры могут возникать и в жидкостях.

## § 3. Устойчивость возбужденных состояний кристалла

Перейдем к вопросу об устойчивости новых состояний. Будем рассматривать устойчивость трех видов: а) по отношению к временным изменениям функции распределения, описывающей структуры; б) по отношению к изменениям формы нитей и пластин; в) по отношению термодинамических вариаций средней плотности в структурах.

Временные изменения функции распределения будем описывать спектром звуковых волн в возбужденных структурах.

Будем рассматривать устойчивость пластинчатых структур, плотность которых зависит только от одной координаты.

Пусть звуковая волна распространяется по нормали к структурам. Проинтегрируем функцию распределения по несущественным переменным  $v_{||}$  и  $v_z$ ; получившаяся в результате функция распределения должна удовлетворять уравнению

$$\frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \quad (\text{III.40})$$

$$U(x, t) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(x', v, t) d\mathbf{r}' dv. \quad (\text{III.41})$$

Полагаем, что временные возмущения функции распределения являются малыми:

$$f = f_0(x, v) + \varphi(x, v, t), \quad |\varphi| \ll f_0. \quad (\text{III.42})$$

Функция распределения  $f_0(x, v)$  в (III.42), описывающая стационарное состояние, есть

$$f_0(x, v) = f_M(v^2) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \exp \left[ -\frac{(x - nc)^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right],$$

где

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_x^2 \bar{K} \Big|_0} \left[ \int_{(abc)} \rho(x) d\mathbf{r} \right]^{-1}, \quad f_M(v^2) = \left( \frac{m}{2\pi\theta} \right)^{1/2} \cdot \exp \left( -\frac{mv^2}{2\theta} \right). \quad (\text{III.43})$$

В линейном приближении уравнение для  $\varphi(x, v, t)$  примет вид

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial U\{\varphi\}}{\partial x} \frac{\partial f_0}{\partial v} - \frac{1}{m} \frac{\partial U\{f_0\}}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial v} = 0, \quad (\text{III.44})$$

$$U\{\varphi\} = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi(x', v, t) d\mathbf{r}' dv,$$

$$U\{f_0\} = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_0(x', v, t) d\mathbf{r}' dv.$$

Как отмечалось в первой главе, парная энергия взаимодействия между частицами зависит от функции распределения:

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \begin{cases} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \geq \tilde{r}_0, \\ \infty, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < \tilde{r}_0; \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

$$K(\tilde{r}_0) = \begin{cases} \frac{1}{\rho} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f d\mathbf{v}, \\ \frac{1}{\rho_0} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_0 d\mathbf{v} + \frac{1}{\rho_1} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_1 d\mathbf{v} + \frac{1}{\rho_2} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_2 d\mathbf{v} + \dots; \end{cases}$$

причем разложение приспособлено для задач, в которых функция распределения представима в виде ряда последовательных приближений

$$f = f_0 + f_1 + f_2 + \dots \quad (\text{III.46})$$

Возникающие члены в выражении для средней кинетической энергии частиц определяются с помощью плотностей частиц, участвующих в создании соответствующих приближений. Приведем пример, в котором поясняется возникновение плотностей  $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \dots$ . Рассматривая задачу о распространении звуковых волн в достаточно плотных статистических средах, находим стационарную добавку к плотности кинетической энергии, обусловленной наличием звукового поля во втором приближении по степеням амплитуд звука (см. главу V):

$$\int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_2 d\mathbf{v} = \frac{mv_\Phi^2}{2} \rho_0 \frac{1}{2} \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2. \quad (\text{III.47})$$

При этом существует также стационарное значение потока частиц в звуковом поле («акустический ветер»)

$$\int_{(\infty)} \mathbf{v} f_2 d\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Phi \rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2, \quad (\text{III.48})$$

где  $\mathbf{v}_\Phi$  — фазовая скорость звука, определяемая формулой

$$v_\Phi^2 = \frac{\sigma(q)\rho_0}{m} + \frac{3\theta}{m} + \dots \quad (\text{III.49})$$

$$\left( \sigma(q) = 4\pi \int_0^\infty K(s) \frac{\sin qs}{qs} s^2 ds \right);$$

по условию приближения  $v_\Phi^2 > 3\theta/m$ .

Выражения для стационарных значений энергии и потока частиц указывают, что эффективное число частиц в единице объема, определяющее значение энергии и потока, имеет одну и ту же величину, равную

$$\rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\delta \rho}{\rho_0} \right)^2, \quad (\text{III.50})$$

поэтому средняя добавка к кинетической энергии частиц при наличии акустического поля определяется формулой

$$\frac{1}{\rho_2} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_2 d\mathbf{v} = \frac{mv_{\Phi}^2}{2}, \quad \rho_2 = \rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\delta \rho}{\rho_0} \right)^2. \quad (\text{III.51})$$

Определенная величина средней кинетической энергии превышает тепловую кинетическую энергию от первого члена разложения, равную  $3/2\theta$ , вследствие того, что фазовая скорость звуковых волн в плотных средах превышает тепловую скорость частиц.

Воспользуемся указанным результатом для определения «радиуса непроницаемости»  $\tilde{r}_0$ , фигурирующего в (III.45), в случае звуковых волн, распространяющихся в пластинчатых структурах:

$$\begin{aligned} \bar{K}(\tilde{r}_0) &= \frac{1}{ab} \iint_{(\infty)} K(r_1 - r_1') dr_1' = \\ &= \frac{1}{\rho_2} \int_{(\infty)} \frac{mv^2}{2} f_2 d\mathbf{v} = \frac{mv_{\Phi}^2}{2} = \bar{\rho}_0 ab \int_{\tilde{r}_0}^{\infty} \bar{K}(s) \cos qs ds. \end{aligned} \quad (\text{III.52})$$

Предположим, что  $\tilde{r}_0$  лежит в области значительных сил отталкивания, так что силами притяжения можно пренебречь (это предположение оправдывается результатом расчета). Воспользуемся выражением (III.52) для  $K(s)$ ,  $\bar{\rho}_0(s)$ , имеем

$$\begin{aligned} \bar{K}(s) &= \bar{u} \left( \frac{r_0}{s} \right)^{10}, \quad \bar{u} = 4\pi u \frac{r_0^2}{ab} \cdot \frac{63}{315}, \\ \bar{\rho} &= \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) dr \right) \cdot [ab(2\pi \langle x^2 \rangle)^{1/2}]^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{III.53})$$

Удерживая главный член, находим

$$\tilde{r}_0 = \frac{9}{\int_{(abc)} \bar{\rho}(x) dr} \sqrt{2\pi \langle x^2 \rangle}. \quad (\text{III.54})$$

Для сравнения вычислим величину радиуса непроницаемой сферы  $(\tilde{r}_0)_0$  в случае температурного равновесия без наличия акустического поля.

Величина этого радиуса определяется из условия

$$\bar{K}((\tilde{r}_0)_\theta) = \bar{u} \left( \frac{r_0}{(\tilde{r}_0)_\theta} \right)^{10} = \frac{0}{2}. \quad (III.55)$$

Она равна

$$(\tilde{r}_0)_\theta = r_0 \left( \frac{8\pi u}{\theta} \frac{r_0^2}{ab} \frac{63}{315} \right)^{1/10}. \quad (III.56)$$

Констатируем, что имеет место разная зависимость обоих радиусов  $\tilde{r}_0$  и  $(\tilde{r}_0)_\theta$  от температуры. Для относительно низких температур радиус непроницаемости в акустическом поле оказывается значительно меньшим, чем в условии температурного равновесия:

$$\tilde{r}_0 \ll (\tilde{r}_0)_\theta; \quad (III.57)$$

при этом

$$(\tilde{r}_0)_\theta > r_0. \quad (III.58)$$

Таким образом, при переходе от стационарного случая к нестационарному, хотя функциональный вид парного молекулярного потенциала взаимодействий остается прежним, изменяется радиус непроницаемой сферы. В условиях акустических волн радиус непроницаемости оказался значительно меньше в сравнении со случаем температурного равновесия.

Рассмотрим четвертый член, фигурирующий в уравнении (III.44) для функции распределения  $\varphi(x, v, t)$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} \bar{U}\{f_0\} \frac{\partial \varphi}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \bar{\rho}_0(x') d\mathbf{r}' \frac{\partial \varphi}{\partial v}. \quad (III.59)$$

Выделим из него член с самовоздействием

$$\delta \bar{U}_s'(x) = \int_{(abc)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \bar{\rho}(x') d\mathbf{r}' = ab \int_{(c)} \bar{K}(|x - x'|) \bar{\rho}(x') dx'. \quad (III.60)$$

Ввиду более медленного изменения функции  $\bar{K}(|x - x'|)$  в сравнении с  $\bar{\rho}(x')$  (радиус непроницаемости  $\tilde{r}_0$  на порядок больше радиуса теплового разброса), член с самовоздействием можно представить в виде ряда

$$\delta \bar{U}_s(x) = ab \left( \int_{(abc)} \rho(x) d\mathbf{r} \right) \left[ \bar{K}(x) + \frac{1}{2!} \langle x^2 \rangle \frac{d^2 \bar{K}(x)}{dx^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} \langle x^4 \rangle \frac{d^4 \bar{K}(x)}{dx^4} + \dots \right]. \quad (III.61)$$

Внутри радиуса непроницаемости

$$|x| \lesssim \tilde{r}_0 = 9 \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right)^{-1} \sqrt{2\pi \langle x^2 \rangle}, \quad \bar{K}(x) = \text{const}$$

и, следовательно,

$$d\delta U_s(x)/dx = 0. \quad (III.62)$$

Таким образом, в исходном уравнении член с самовоздействием, входящий в выражение

$$\frac{\partial}{\partial x} \bar{U} \{f_0\} = \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_0(x', v, t) d\mathbf{r}' dv,$$

выпадает для значительной окрестности около центра элементарной ячейки.

На основании указанного исходное уравнение для описания акустического поля в пластинчатых структурах можно записать так:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \frac{\partial f_0}{\partial v} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_0(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \frac{\partial \varphi}{\partial v} = 0. \quad (\text{III.63})$$

Это уравнение для акустических колебаний в одномерном кристалле отличается от такого для случая пространственно-однородной среды в двух пунктах:

1. В третьем члене имеет место пространственно-периодическое изменение параметра, вследствие того, что

$$f_0(x, v) = f_M(v^2) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right] \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \times \exp \left[ -\frac{(x - n\bar{c})^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right]. \quad (\text{III.64})$$

2. Имеется четвертый член, содержащий производную функцию распределения по скорости  $\partial \varphi / \partial v$ , тогда как в пространственно-однородном случае этот член выпадает из рассмотрения:

$$\frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = 0. \quad (\text{III.65})$$

Наибольшую сложность вносит последний (четвертый) член уравнения для  $\varphi(x, v, t)$ . Однако существуют причины, по которым он может рассматриваться как малый. В узлах решетки невозмущенный потенциал

$$\bar{U} \{f_0\} = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_0(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \quad (\text{III.66})$$

имеет минимум, поэтому акустическое поле в кристаллической структуре в счетном количестве точек описывается уравнением без четвертого члена.

Интеграл, имеющийся в четвертом члене, распространен по области теплового разброса, невозмущенная функция распределения  $f_0(x, v)$  заметно отлична от нуля в точках

$$|x_\alpha| \leq \left[ \frac{\theta}{\partial_x^2 \bar{K}} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right)^{-1} \right]^{1/2} \ll (abc)^{1/2}. \quad (\text{III.67})$$

В указанной области имеет место отрицательное значение молекулярного потенциала — по абсолютной величине значительно меньшее положительных значений молекулярных взаимодействий, которые фигурируют в третьем члене исходного уравнения. Это обстоятельство позволяет ввести малый параметр  $\varepsilon$  сомножителем у четвертого члена и искать решение в виде ряда

$$\varphi(x, v, t) = \varphi_0(x, v, t) + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \dots \quad (\text{III.68})$$

В нулевом приближении уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial\varphi_0}{\partial t} + v \frac{\partial\varphi_0}{\partial x} - \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_0(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \cdot \frac{\partial f_M}{\partial v} \times \\ \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \exp \left[ -\frac{(x - n\bar{c})^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right] = 0. \quad (\text{III.69})$$

Будем искать решение уравнения (III.69) в виде акустических волн, модулированных периодической структурой кристалла:

$$\varphi_0(x, v, t) = e^{-i(\omega t + kx)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n(v) e^{inax}, \quad a = 2\pi/\bar{c}. \quad (\text{III.70})$$

Выражение для периодической плотности распределения частиц удобно записать в виде ряда Фурье

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \exp \left[ -\frac{(x - n\bar{c})^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha_n e^{inax}. \quad (\text{III.71})$$

Коэффициенты разложения  $\alpha_n$  даются формулой

$$\alpha_n = \frac{1}{c} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \times \\ \times \int_0^{\bar{c}} \exp \left[ -\frac{(x - k\bar{c})^2}{2 \langle x^2 \rangle} - 2\pi i \frac{n}{c} x \right] dx. \quad (\text{III.72})$$

Вводя в интегралах для  $\alpha_n$  замену переменных интегрирования  $x = z + m\bar{c}$  и учитывая, что  $e^{2\pi i n} = 1$ , получаем

$$\alpha_n = \frac{1}{c} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{ab} (2\pi \langle x^2 \rangle)^{-1/2} \times \\ \times \int_{-k\bar{c}}^{(-k+1)\bar{c}} \exp \left( -\frac{z^2}{2 \langle x^2 \rangle} - 2\pi i \frac{n}{c} z \right) dz. \quad (\text{III.73})$$

Распространяя пределы интегрирования до бесконечности, имеем окончательно

$$\alpha_n = \frac{1}{abc} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(\dots) d\mathbf{r} \right) \exp \left( -\frac{2\pi^2 n^2 \langle x^2 \rangle}{c^2} \right). \quad (\text{III.74})$$

Подстановка предполагаемого решения в виде модулированных волн в исходное уравнение дает

$$i\omega b_n + i(na - k)b_n - \frac{1}{m} \frac{\partial f_M}{\partial v} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i\alpha_l [(n-l)a - k] \times \\ \times \sigma[(n-l)a - k] \cdot \int_{-\infty}^{\infty} b_{n-l}(v) dv = 0, \quad (\text{III.75})$$

где

$$\sigma(k) = \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{ik(x-x')} d\mathbf{r}'. \quad (\text{III.76})$$

Разделим обе части уравнения на  $i[\omega + (na - k)v]$  и проинтегрируем по  $v$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} b_n(v) dv - \\ - \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M dv}{\omega + (na - k)v} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_{n-m} (ma - k) \sigma(ma - k) \int_{-\infty}^{\infty} b_m(v') dv' = 0. \quad (\text{III.77})$$

Рассмотрим случай малых температур. Так как при  $\theta \rightarrow 0$

$$f_0(v, x) = f_M(v^2) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( \int_{(abc)} \bar{\rho}(x) d\mathbf{r} \right) \frac{1}{ab} \delta(x - na), \quad (\text{III.78})$$

то  $\alpha_{m-n} \rightarrow 1$ , и условием разрешимости системы уравнений для

$\int_{-\infty}^{\infty} b_n(v) dv$  является равенство

$$1 - \frac{1}{m} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (na - k) \sigma(na - k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M dv}{\omega + (na - k)v} = 0. \quad (\text{III.79})$$

Это соотношение представляет собою дисперсионное уравнение для волн в одномерном кристалле при  $\theta \rightarrow 0$ . Оно должно дать ответ на вопрос о действительности частот  $\omega$  и привести к доказательству устойчивости рассматриваемой конфигурации. Исследование устойчивости можно проводить, основываясь на методе годографа

[23]. Этот метод заключается в анализе поведения функции  $\varepsilon$  в зависимости от комплексного числа  $z$  при перемещении  $z$  по контуру  $G$ , где эта функция определена. В нашем случае

$$\varepsilon(z) = 1 - \frac{1}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (na - k) \sigma(na - k) \int_0^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{z + (na - k)v} dv. \quad (\text{III.80})$$

На основании известного результата теории аналитических функций число нулей функции  $\varepsilon(z)$  внутри контура  $G$ , изображенного на рис. 5, *a* и *б*, определяется формулой

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_G \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)} dz, \quad (\text{III.81})$$

если функция  $\varepsilon(z)$  не имеет полюсов внутри контура. В нашем случае на основании аналитичности интеграла Коши в верхней

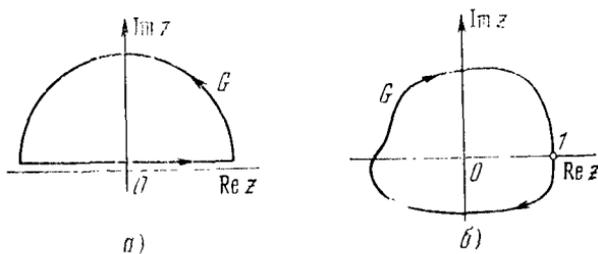


Рис. 5.

полуплоскости, если  $N \neq 0$ , существует по крайней мере один корень уравнения

$$\varepsilon(z) = 0. \quad (\text{III.82})$$

Выражение (III.81) для числа нулей можно переписать в виде

$$N = \frac{1}{2\pi i} A_G \ln \varepsilon(z) = \frac{1}{2\pi} A_G \arg \varepsilon(z), \quad (\text{III.83})$$

где символ  $A_G$  обозначает приращение какой-либо функции от  $z$  при обходе переменной  $z$  контура  $G$ . Как видно из этого равенства,  $N \neq 0$ , если годограф функции  $\varepsilon(z)$  хотя бы раз обходит начало координат (рис. 5, *б*). Годографом здесь мы называем кривую, которую вычерчивает конец вектора, направленного в точку  $\varepsilon(z)$  на плоскости комплексного переменного  $\text{Im } \varepsilon$ ,  $\text{Re } \varepsilon$  при движении  $z$  по контуру  $G$ . Значение функции  $\varepsilon$  при  $z$ , находящемся на полуокружности, как известно из теории интеграла Коши, равно единице.

При стремлении же  $z$  к действительной оси

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{1}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma(na - k) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{\omega(na - k) + v} dv + i\pi \partial_v f_M \right] \frac{\omega}{na - k}, \quad (\text{III.84})$$

как следует из формул Племеля — Привалова. Интеграл здесь понимается в смысле главного значения,  $\omega = \text{Re } z$ . Годограф пересекает второй раз действительную ось в точке, в которой распределение  $f_M(v^2)$  имеет максимум, т. е. при  $\omega = 0$ .

Это пересечение происходит в точке с координатами

$$\begin{aligned} \left[ 1 + \frac{\rho_0}{m} \left( \frac{m}{2\pi\theta} \right)^{1/2} \frac{m}{\theta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v \exp(-m_0^2/2\theta)}{v} dv \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma(na - k), 0 \right] = \\ = \left[ 1 + \frac{\rho_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma\left(\frac{2\pi}{c}n - k\right), 0 \right]. \end{aligned} \quad (\text{III.85})$$

В том случае, когда

$$1 + \frac{\rho_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma\left(\frac{2\pi}{c}n - k\right) < 0, \quad (\text{III.86})$$

контур обходит начало координат, что ведет к существованию корней уравнения  $\varepsilon(z) = 0$  в верхней полуплоскости. Таким образом, критерием существования действительных значений  $\omega$ , т. е. критерием устойчивости решеточно-пластинчатых структур, является требование

$$1 + \frac{\rho_0}{m} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sigma\left(\frac{2\pi}{c}m - k\right) > 0. \quad (\text{III.87})$$

Учитывая, что наибольшим членом в сумме является член с  $m = 0$

$$\sigma(k) = \int K(|r - r'|) e^{-ik(x-x')} dx' \quad (\text{III.88})$$

и что возникающий здесь интеграл включает силы отталкивания на расстояниях наибольшего сближения точек  $r$  и  $r'$ , заключаем, что

$$\sigma(k) > 0,$$

по крайней мере для длинных волн.

Таким образом, требование устойчивости для решеточно-пластинчатых структур по отношению к звуковым волнам в структурах выполняется.

Аналогичный результат имеет место для нитевидных и кристаллических состояний.

К устойчивости пластинчатых структур по отношению к распространению звуковых волн в них можно прийти, непосредственно вычисляя дисперсию и затухание звуковых волн.

Будем исходить из полученного выше уравнения (III.63) для амплитуд акустического поля первого приближения. Опустив последний член в уравнении, ограничиваясь информацией о звуковом поле только в точках, находящихся внутри областей теплового разброса атомов, в окрестности узлов решетки (в этих областях куполообразное распределение плотности можно заменить пространственно-однородным распределением) и применяя к исходному уравнению (III.63) для  $\varphi(x, v, t)$  преобразование Лапласа относительно  $t$  и преобразование Фурье относительно  $x$ , приходим к следующим дисперсионным соотношениям для звуковых волн в направлении нормали к пластинам:

$$v_{\Phi}^2 \equiv \left(\frac{\omega}{k}\right)^2 = \frac{\bar{\rho}}{m} \sigma(k) + \frac{\theta}{m} + \dots,$$

$$\gamma = -k \frac{v_{\Phi}^2}{2} \pi \frac{\partial f_M}{\partial v_{\Phi}}(v_{\Phi}^2),$$

$$\sigma(k) = 2ab \int_0^{\langle x^2 \rangle^{1/2}} \bar{K}(s) \cos ks \, ds,$$

$$f_M = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mv_{\Phi}^2}{2\theta}\right).$$
(III.89)

Полученные соотношения и метод их вывода вполне аналогичны рассмотренным в главе IV. В этих формулах  $v_{\Phi}$  и  $\gamma$  — фазовая скорость и затухание волн. Так как  $v_{\Phi}$  оказывается действительным числом и  $\gamma > 0$  — заключаем об устойчивости пластинчатых структур по отношению к временным изменениям функции распределения по аналогии с устойчивостью, полученной по методу годографа.

Заметим, что механизм распространения звука в рассматриваемой модели статистических структур отличен от классической теории. Во-первых, он связан с учетом самовоздействия. Соответствующий член получился при учете взаимодействий внутри элементарной ячейки каждой из пластин:

$$U\{\varphi\} = \int_{(ab\bar{z})} K(|r - r'|) \varphi(x', v, t) dr' dv.$$

Он оказался принципиальным при установлении устойчивости

структур, определяя знак квадрата частоты колебаний

$$\omega^2 = k^2 \frac{\rho}{m} 2ab \int_0^{\langle x^2 \rangle^{1/2}} \bar{K}(s) \cos ks \, ds > 0.$$

Во-вторых, рассматриваемый механизм связан с отказом от сохранения нормировки на одну элементарную ячейку, так как

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{(abc)(\infty)} \int \varphi(x, v, t) \, dr \, dv \neq 0.$$

Указанные обстоятельства являются причиной того, что общеизвестный вывод о неустойчивости одномерных периодических структур неприменим к излагаемой теории.

Рассмотрим теперь устойчивость по отношению к изменению формы самих возбужденных структур.

Осуществим вариацию формы через изменение плотности у поверхности самих структур. Так как толщина структур мала в сравнении с периодом решеток, то ответственным за устойчивость является изменение энергии только внутри структур при учете потенциальной ямы, в которой они находятся. По этой же причине основную роль играют силы отталкивания между деформированными элементами. Изменение потенциальной энергии подсчитаем по формуле

$$\begin{aligned} \epsilon_0 + \delta\epsilon &= \frac{1}{2} \int (U_0 + \delta U)(\rho_0 + \delta\rho) \, dr, \\ \delta U &= \int K(|r - r'|) \delta\rho(r') \, dr'. \end{aligned}$$

Заменим вариацию объемной плотности поверхностной плотностью, как это делается при анализе устойчивости гравитационных фигур.

Используя экранированный потенциал (I.12) при подсчете взаимодействия между элементарными объемами нитей, для изменения суммарного молекулярного потенциала вне и внутри нитевидной структуры получим

$$\delta U^{(1)}(r, x, \varphi) = 4\pi\bar{\rho}a_n R G I_n (\sqrt{x^2 + k^2 R}) K_n(\sqrt{x^2 + k^2 r}) \cos kx \cos n\varphi, \quad (\text{III.90})$$

$$\delta U^{(2)}(r, x, \varphi) = 4\pi\bar{\rho}a_n R G K_n(\sqrt{x^2 + k^2 R}) I_n(\sqrt{x^2 + k^2 r}) \cos kx \cos n\varphi,$$

где обозначено  $R = \langle x^2 \rangle_{\perp}^{1/2}$ ,  $a_n$  — максимальная деформация средней толщины нитей,  $k$  — волновое число поверхностных волн,  $\bar{\rho}$  — средняя плотность структур до деформации (усредненная по радиусу нити).

На основании выражений для потенциалов  $\delta U^{(1)}$  и  $\delta U^{(2)}$  можно подсчитать изменение потенциальной энергии нити при деформации, рассчитанной на единицу длины. Получаем

$$\delta \bar{\epsilon}_n = \frac{1}{2} \gamma_n R^2 a_n^2 \bar{\rho} [\partial_x^2 \bar{K} + 4\pi G \bar{\rho} I_n (\sqrt{\kappa^2 + k^2} R) K_n (\sqrt{\kappa^2 + k^2} R)], \quad (\text{III.91})$$

$$\gamma_n = \begin{cases} \pi/2, & n \neq 0, \\ \pi, & n = 0. \end{cases}$$

Отсюда заключаем, что при произвольных значениях величин  $n$  и  $k$   $\delta \bar{\epsilon}_n > 0$ , что доказывает устойчивость нитей по отношению к изменению их формы.

Учет сил притяжения вдоль нити, а также учет изменения потенциальных ям в энергии взаимодействия самих нитей не изменят результата об их устойчивости, так как эти взаимодействия проявляются на больших расстояниях, где они являются малыми относительно сил отталкивания.

Вполне аналогичные результаты получаются при рассмотрении устойчивости по отношению к изменению формы в случае пластинчатых структур. При деформации пластин толщиной  $2h = \langle x^2 \rangle^{1/2}$  изменение молекулярного потенциала таково:

$$\begin{aligned} \delta U^{(1)}(x, z) &= \frac{4\pi G \bar{\rho}}{k'_z} a \frac{\text{sh } k'_z x / \text{sh } k'_z h}{1 + \text{th } k'_z h} \cos k_z z, \\ \delta U^{(2)}(x, z) &= \frac{4\pi G \bar{\rho}}{k'_z} a \frac{\exp [k'_z (h - x)]}{1 + \text{th } k'_z h} \cos k_z z, \end{aligned} \quad (\text{III.92})$$

где  $k'_z = \sqrt{\kappa^2 + k_z^2}$  для случая симметричных (относительно центральной плоскости) деформаций поверхности пластины. Вполне аналогичные выражения получаются для антисимметрических деформаций — с заменой  $\text{sh}$  на  $\text{ch}$ .

Изменение потенциальной энергии определяется формулой

$$\delta \bar{\epsilon} = \frac{1}{2} h l a^2 \bar{\rho} \left[ \partial_x^2 \bar{K} + 4\pi G \bar{\rho} \frac{1}{k'_z h (1 + \text{th } k'_z h)} \right]; \quad (\text{III.93})$$

для антисимметрических деформаций выражение аналогично. Заключаем, что  $\delta \bar{\epsilon} > 0$  при любых значениях  $k_z$ .

В качестве дополнения отметим следующее. Для достаточно большой совокупности нитевидных структур, расположенных в одном направлении, полученный выше вывод об их устойчивости неверен. Если толщина совокупности нитей превышает толщину поверхностного слоя, в котором возникает поверхностное натяжение, то за счет его возникновения цилиндрическая конфигурация совокупности нитей становится неустойчивой при учете кривизны ограничивающей поверхности. Толщину перепада концев-

традий, которая обеспечивает появление поверхностного натяжения, мы определим ниже — она оказывается порядка нескольких сотен ангстрем.

Для пластинчатых структур наличие поверхностного натяжения не изменяет их устойчивости.

Рассмотрим теперь вопрос о термодинамической устойчивости блоков из пластинчатых (или нитевидных) структур, считая их вкраплениями в другую кристаллическую фазу. Для этого необходимо знать свободную энергию структур, выраженную через потенциальную энергию взаимодействия частиц в структурах. Имеем

$$\exp\left(-\frac{\psi}{\theta}\right) = \left[ \int \exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta} - \frac{\varepsilon}{N\theta}\right) \frac{dr dv}{g} \right]^N, \quad \varepsilon = \frac{1}{2} \int U(r) \rho(r) dr,$$

$$U(r) = \int K(|r - r'|) \rho(r') dr', \quad \rho(r) = C \exp\left[-\frac{U(r')}{\theta}\right]. \quad (\text{III.94})$$

Используем для конкретизации  $U(r)$  и  $\rho(r)$  их выражения, полученные выше без учета термодинамических возмущений. Внутреннюю структуру нитей и пластин будем считать неизменной при изменении блоков из них, поэтому опустим член с самовоздействием. Для пластинчатых структур получим

$$\begin{aligned} \varepsilon &= N \left[ \frac{1}{2} \left( \int_{(a', \bar{c})} \bar{\rho}(x) dx \right) \sum_l' \bar{K}(\bar{l}c) + \frac{\theta}{2} \right], \\ \psi &= N \left[ -\theta \ln \left( \frac{2\pi\theta}{m} \right) V g^{-1} + \frac{\varepsilon}{N} \right], \\ N &= N_{\text{яч}} \int_{(a', \bar{c})} \bar{\rho}(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{III.95})$$

Вполне аналогичные выражения получаются для нитевидных и решеточно-точечных структур.

Введем плотность вероятности местоположения пластин  $\tilde{\rho}(x)$  путем сглаживания плотности вероятности частиц, находящихся в структурах. За удельный объем примем  $V = 1/\tilde{\rho}(x)$ . Молекулярный потенциал в точке  $x$  представим в виде

$$\sum_h' \bar{K}(|x - x_h|) = \int K(|x - x'|) \tilde{\rho}(x') dx'. \quad (\text{III.96})$$

Плотность свободной энергии внутри блока определяется так:

$$d\psi = \frac{\psi(x)}{N} \tilde{\rho}(x) dx.$$

Для свободной энергии блока имеем

$$\Psi = \int_1^2 \rho(x) \left\{ -\theta \left[ \ln \left( \frac{2\pi\theta}{m} \right)^{3/2} \frac{1}{\tilde{\rho}(x)} g^{-1} - \frac{1}{2} \right] + \frac{1}{2} \int_1^2 \bar{K}(|x-x'|) \tilde{\rho}(x') dx' \right\} dx, \quad (\text{III.97})$$

где предельные значения относятся к пластинчатой и соответственно кристаллической среде.

Задача на устойчивость сводится к определению минимума  $\Psi$  для всех вариаций  $\tilde{\rho}(x)$ , совместимых с постоянством температуры, и массы всей системы:

$$\int_1^2 \tilde{\rho}(x) dx = \text{const}, \quad \theta = \text{const}.$$

Предельные значения  $x$  не должны подвергаться варьированию — в исходном аппарате можно накладывать физические условия только на функции распределения.

Если ограничиться плавными изменениями  $\tilde{\rho}(x)$  по сравнению с протяженностью действия молекулярных сил, то вариационная задача близка к той, которая решена в термодинамической теории капиллярности Ван-дер-Ваальса [26]. Отличие заключается в объекте рассмотрения, перенормировке термодинамических функций и особенно в значениях появляющихся интегралов молекулярного потенциала.

Условия равновесия и устойчивости вкрапленной структуры приводятся к минимуму функционала  $I$ :

$$\delta I = 0, \quad \delta^2 I > 0,$$

$$I = \int_1^2 \tilde{\rho}(x) \left\{ -\theta \left[ \ln \left( \frac{2\pi\theta}{m} \right)^{3/2} \frac{1}{\tilde{\rho}(x)} g^{-1} - \frac{1}{2} \right] - c_0 \tilde{\rho}(x) - \frac{c_2}{2!} \frac{d^2 \tilde{\rho}(x)}{dx^2} - \mu \right\} dx; \quad (\text{III.98})$$

здесь  $c_{2n} = -2 \int_0^\infty \bar{K}(s) s^{2n} ds$ ,  $n = 0, 1$ ;  $\mu$  — постоянная, которая

может быть вычислена. Первая вариация приводит к отлнчию внутреннего давления в переходном слое от внешнего давления, условие на вторую вариацию содержит два интеграла:

$$\delta^2 I = \left[ - \int_0^\infty \bar{K}(s) s^2 ds \right] \int_1^2 \left( \frac{d\tilde{\rho}(x)}{dx} \right)^2 \left( \frac{dt(x)}{dx} \right)^2 dx > 0, \quad (\text{III.99})$$

где  $t(x)$  — некоторая функция, производная которой не равна тождественно нулю. Это условие накладывает ограничение на знак первого интеграла. Необходимо, чтобы в указанном смысле силы притяжения преобладали над силами отталкивания. В результате отсутствия области интенсивного отталкивания последнее требование осуществимо. Поэтому условия равновесия и устойчивости оказываются выполненными.

Толщина перепада приблизительно определяется формулой

$$\langle s^2 \rangle^{1/2} \approx 24 \ln 10 \left( \frac{\bar{\rho}}{\rho} \right)^{-1} \left[ \int_0^{\infty} \bar{K}(s) s^2 ds / \int_0^{\infty} \bar{K}(s) ds \right]^{1/2}, \quad (\text{III.100})$$

здесь по указанной причине  $\int_0^{\infty} \bar{K}(s) ds > 0$ ,  $\frac{\bar{\rho}}{\rho}$  — относительное изменение средней плотности при переходе из блока структур в кристаллическую или аморфную фазу, которое определялось в § 2 настоящей главы. Величина  $\langle s^2 \rangle^{1/2}$  превышает молекулярные размеры приблизительно в шестьсот раз.

Таким образом, нитевидные и пластинчатые структуры оказываются устойчивыми по отношению к временным изменениям функции распределения, описывающей структуры, т. е. по отношению к звуковым волнам в структурах, по отношению к изменению формы нитей и «пластин», а также по отношению к термодинамическим вариациям средней плотности в блоках из указанных структур, вкрапленных в другую фазу.

В статистической модели кристалла первичным понятием является вероятность местонахождения частиц в узлах, не требующая какого-либо процесса усреднения по времени или начальным условиям. Рассмотрена связь динамической теории решетки с теорией упругости, выявлена трудность перехода динамической теории решетки в теорию упругости, построена термодинамика (особая) для статистической модели кристалла, с помощью которой указанная трудность устраняется. Получено термодинамическое выражение для скорости звука. Рассмотрен механизм распространения звуковых волн в статистической модели кристалла на основе кинетического уравнения и получено выражение для скорости и затухания звуковых волн. Кинетическое рассмотрение приводит к пространственной модуляции звуковых волн периодической структурой кристаллов.

Новый механизм распространения звука связан с изменением нормировки вероятности местоположения атомов в окрестности узлов решетки, при этом не происходит изменения размеров и формы элементарной ячейки.

Напомним, что в общепринятом подходе исходят из сохранения нормировки вероятности местоположения атомов в объемах, содержащих размах колебаний.

### § 1. Связь теории упругости с динамической теорией решетки

В динамической теории решетки выводятся уравнения теории упругости и упругие постоянные сопоставлением решения механических уравнений для длинноволновых колебаний в решетке с решением феноменологического волнового уравнения теории упругости.

Исходные уравнения динамической теории в гармоническом приближении и волновое уравнение теории упругости следующие:

$$m_k \ddot{u}_\alpha \left( \begin{matrix} l \\ k \end{matrix} \right) = \sum_{\beta l' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l & l' \\ k & k' \end{matrix} \right) u_\beta \left( \begin{matrix} l' \\ k' \end{matrix} \right), \quad \rho \ddot{u}_\alpha = \sum_{\beta\gamma\lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \frac{\partial^2 \tilde{u}_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\lambda}. \quad (\text{IV.1})$$

---

\*) Расширенное изложение доклада на Всесоюзной акустической конференции [15] (см. также [14]).

Уравнения теории решетки получены из точных уравнений движения разложением около положения равновесия, при условии, что отклонения атомов от положения равновесия  $u_\alpha \binom{l}{k}$  малы по сравнению с периодом решетки (гармоническое приближение). Для длинноволновых колебаний решение исходных уравнений ищется в виде

$$u_\alpha \binom{l}{k} = \left[ \bar{u}_\alpha(j) + \bar{u}_\alpha^{(1)}(k \mid j) + \bar{u}_\alpha^{(2)}(k \mid j) + \dots \right] e^{2\pi i \mathbf{y} \cdot \mathbf{x} - i\omega t},$$

$$\bar{u}_\alpha(x) = \bar{\bar{u}}_\alpha e^{2\pi i \mathbf{y} \cdot \mathbf{x} - i\omega t}, \quad (\text{IV.2})$$

что приводит к следующим соотношениям для амплитуд колебаний атомов решетки и для амплитуд смещений упругого континуума:

$$\frac{\sum_k m_k}{v} \left[ \omega^{(1)}(\mathbf{y} \mid j) \right]^2 \bar{u}_\alpha(j) =$$

$$= 4\pi^2 \sum_\beta \left\{ \sum_{\gamma\lambda} ([\alpha\beta\gamma\lambda] + (\alpha\gamma\beta\lambda) y_\gamma y_\lambda) \right\} \bar{u}_\beta(j),$$

$$\rho \omega^2 \bar{\bar{u}}_\alpha = 4\pi^2 \sum_\beta \left\{ \sum_{\gamma\lambda} \bar{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} y_\gamma y_\lambda \right\} \bar{\bar{u}}_\beta. \quad (\text{IV.3})$$

Соотношение для амплитуд колебаний атомов нулевого (по модулю волнового числа) приближения получено как условие разрешимости уравнения для второго приближения. Квадратные и круглые скобки с индексами в этом уравнении выражаются через коэффициенты

$$\Phi_{\alpha\beta} \binom{l}{k} \binom{l'}{k'} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_\alpha \binom{l}{k} \partial u_\beta \binom{l'}{k'}} \Big|_0, \quad (\text{IV.4})$$

где индекс 0 означает, что производные берутся в несмещенном положении.

Сопоставление полученных уравнений для амплитуд дает

$$\rho = \frac{\sum_k m_k}{v}, \quad \omega^2 = \left[ \omega^{(1)}(\mathbf{y} \mid j) \right]^2,$$

$$\bar{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} = c_{\alpha\gamma\beta\lambda} = [\alpha\beta\gamma\lambda] + [\alpha\gamma\beta\lambda] - [\beta\lambda\alpha\gamma] + (\alpha\gamma\beta\lambda), \quad (\text{IV.5})$$

и кроме того:

$$\bar{u}_\alpha(j) = A^2 \bar{\bar{u}}_\alpha, \quad A^2 = \text{const.}$$

Таким образом, нулевое приближение смещения атомов и величина смещения упругого континуума отличаются постоянным коэффициентом пропорциональности. Для получения численного значения безразмерного коэффициента воспользуемся выражениями

для плотности энергии в обеих теориях:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} c_{\alpha\gamma\beta\lambda} U_{\alpha\gamma}^{(1)} U_{\beta\lambda}^{(1)},$$

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{U}_{\alpha\gamma} \tilde{U}_{\beta\lambda}. \quad (\text{IV.6})$$

При этом учитываем, что выражение для плотности энергии в случае длинноволновых колебаний тождественно совпадает с выражением для случая однородных деформаций. Параметры деформации следующие:

$$U_{\alpha\beta}^{(1)} = 2\pi i y_{\beta} \bar{u}_{\alpha}(j), \quad \tilde{U}_{\alpha\beta} = 2\pi i y_{\beta} \tilde{u}_{\alpha}. \quad (\text{IV.7})$$

Используя выражения для плотности энергии и параметров деформации, а также соотношение для амплитуд смещений, находим

$$V = \frac{1}{2} A^2 \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{U}_{\alpha\gamma} \tilde{U}_{\beta\lambda} = A^2 \mathcal{V}. \quad (\text{IV.8})$$

Но поскольку выражение для плотности энергии не должно зависеть от способа рассмотрения, получаем, что  $A^2 = 1$  или  $A = \pm 1$ , т. е.

$$|u_{\alpha}(j)| = |\tilde{u}_{\alpha}|. \quad (\text{IV.9})$$

Таким образом, динамическая модель кристалла приводит к равенству амплитуд смещений атомов решетки и амплитуд смещений в упругом континууме. Однако этот результат приводит к трудности, поскольку смещения атомов ограничены условием  $u_{\alpha}(j) < 10^{-8}$  см, а упругие смещения, описывающие опытные данные, лежат в широком интервале значений  $\tilde{u}_{\alpha} \sim 10^{-13} \div 10^{-6}$  см.

В экспериментальных работах определяют смещения среды через пересчет подводимой мощности к пьезокварцу на изменение объема при колебаниях, пользуясь соотношениями теории упругости. В излагаемой теории величина объема системы всецело определяется функцией распределения, включая его изменение под влиянием акустических колебаний:

$$(L + \Delta L)^3 = \prod_{\alpha=1}^3 \left( \iint_{(\infty)} x_{\alpha}(f_0 + \varphi) dr dv \right) / \left( \iint_{(\infty)} (f_0 + \varphi) dr dv \right). \quad (\text{IV.10})$$

В тех случаях, когда экспериментальные методы гарантируют непосредственный сдвиг вещества твердого тела, теория подобных сдвигов также должна быть непосредственно (без перехода к теории упругости) связана с изменением функции распределения.

§ 2. Термодинамика для статистической модели кристалла.  
 Определение скорости звука.  
 Связь между микро- и макросмещениями

Поставим задачу приспособления метода Гиббса к статистической модели кристалла. Выразим свободную энергию для одной частицы через нелокальное выражение энергии взаимодействия частиц в кристалле:

$$e^{-\psi/\theta} = \int\int_{V(\infty)} e^{-H/\theta} \frac{dr dv}{g}, \quad H = \frac{mv^2}{2} + \frac{\varepsilon}{N},$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int U(r) \rho(r) dr, \quad U(r) = C \int K(|r - r'|) e^{-l'(r'')/\theta} dr',$$

$$\rho(r) = C e^{-U(r)/\theta}, \quad N = \int_V \rho(r) dr, \quad \frac{\varepsilon}{N} = \hat{\varepsilon}. \quad (\text{IV.11})$$

Эти формулы являются исходными для построения термодинамики. К особенностям метода относятся: 1) аналог функции Гамильтона  $H$  является нелинейным функционалом от плотности вероятности  $\rho(r)$ ; 2) этот функционал зависит от температуры; 3) полное число частиц  $N$  в системе определяется плотностью вероятности, а поэтому не обязательно должно быть целым.

В нелокально-статистической модели кристалла полная вероятность местоположения атома в узле решетки  $\int_{(abc)} \rho(r) dr$  остается в теории произвольной.

Целочисленность относится только к числу элементарных ячеек, но не к общему числу частиц  $N = N_{\text{лч}} \int_{(abc)} \rho(r) dr$ . Поэтому в термодинамике величину  $\int_{(abc)} \rho(r) dr$  можно принять за непрерывный внешний параметр, по которому в дальнейшем будет производиться дифференцирование.

С л е д с т в и е. Даже в случае, когда  $abc = \text{const}$ ,  $N = \text{const}$ , имеет место изменение объема всего кристалла:

$$V + \Delta V = N(abc) \int_{(abc)} (\rho + \Delta\rho) dr,$$

вследствие изменения заполняемости ячеек.

Для внутренней энергии  $u$ , приходящейся на одну частицу, и обобщенной силы  $A_k$ , соответствующей внешнему термодинами-

ческому параметру  $a_k$ , имеем

$$u = \iint_{V(\infty)} H e^{(\psi-H)/\theta} \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{r}}{g} = \psi - \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta},$$

$$A_k = \iint_{V(\infty)} \left( -\frac{\partial H}{\partial a_k} \right) e^{(\psi-H)/\theta} \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{v}}{g} = -\frac{\partial \psi}{\partial a_k}.$$
(IV.12)

Член  $\theta \partial \hat{\epsilon} / \partial \theta \neq 0$  в выражении (IV.12) для внутренней энергии не появляется в общепринятом подходе. С помощью выражений (IV.12) для  $u$  и  $A_k$  находим следующую форму второго начала термодинамики:

$$du + \sum_k A_k da_k = \theta \left( -\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + da, \quad a = \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta}. \quad (\text{IV.13})$$

Таким образом, выражение для энтропии  $S = -\partial \psi / \partial \theta$  не изменяется. Перенормированные значения других термодинамических функций, аналогичных внутренней энергии, находятся из (IV.12) и (IV.13). Для термодинамического потенциала  $\Phi(p, \theta)$  имеем

$$\Phi(p, \theta) = u - \theta s + \sum_k A_k a_k - \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta},$$
(IV.14)

$$d\Phi = -s d\theta + \sum_k a_k dA_k.$$

Развитая на этом пути термодинамика может быть применимой и для статистических структур, отличных от кристаллических.

Для статистической модели кристалла конкретизируем внешние термодинамические параметры  $a_k$  и выражение энергии взаимодействия частиц  $\epsilon$  с помощью решений для невозмущенного состояния кристалла. При этом надо учитывать следующее.

Во-первых, все величины, характеризующие кристаллическое состояние, выражаются через нормировку вероятности на одну ячейку  $\int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ , которая остается в стационарной теории произвольной. Именно эту величину необходимо принять за внешний термодинамический параметр.

Во-вторых, в стационарной теории параметры элементарной ячейки  $a, b, c$  определяются из условий минимума функции  $\sum_{h, k, l} K(|\mathbf{r} - (h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c})|)$  и ее производных в узлах решетки, вви-

ду чего эти параметры не могут зависеть от величины  $\int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ .

Выбирая за удельный объем, т. е. объем, приходящийся на одну частицу:

$$v = abc \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = a^*b^*c^*, \quad (\text{IV.15})$$

закключаем, что изменение удельного объема будет определяться изменением нормировки вероятности на узел решетки.

Потенциальную энергию взаимодействия  $\varepsilon$  разобьем на энергию взаимодействия элементарных ячеек между собой и энергию взаимодействия элементов облака вероятности внутри одной элементарной ячейки (энергию самовоздействия). Для подсчета первой части можно воспользоваться распределением вероятности  $\rho(\mathbf{r})$  без учета термодинамических возмущений, т. е. используя решение для стационарного случая. Энергия же самовоздействия чувствительна к малым изменениям плотности  $\rho(\mathbf{r})$  в узлах ввиду быстрого изменения парного потенциала на малых расстояниях. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{V}} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \varepsilon_c + \varepsilon_{\text{вз}}, \\ \varepsilon_c &= \frac{N_{\text{яч}}}{2} \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^2 \iint_{(abc)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \\ \varepsilon_{\text{вз}} &= \frac{N_{\text{яч}}}{2} \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \times \\ &\quad \times \left[ \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \sum'_{h, k, l} K(|h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}|) + 3\theta + O(\theta) \right], \\ \rho(\mathbf{r}') &= \left( \int_{(abc)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \hat{\rho}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{IV.16})$$

Используя исходное выражение для свободной энергии, получаем

$$\begin{aligned} \psi &= -\theta \ln \left( \frac{2\pi\theta}{m} \right)^{3/2} N v g^{-1} + \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{V}} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \\ &\quad + \frac{abc}{v} \frac{1}{2} \sum'_{h, k, l} K(|h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}|) + \frac{3}{2} \theta + \dots, \end{aligned} \quad (\text{IV.17})$$

откуда для давления и скорости звуковых волн имеем

$$\begin{aligned} p &= -\frac{\partial \psi}{\partial v} = \frac{abc}{v^2} \left[ \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{V}} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum'_{h, k, l} K(|h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}|) \right] + \frac{\theta}{v}, \end{aligned} \quad (\text{IV.18})$$

$$v_{\Phi}^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \frac{abc}{mv} \left[ \iint K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \sum'_{h, k, l} K(|ha + kb + lc|) \right] + \frac{\theta}{m}, \quad \rho = \frac{m}{v}.$$

Заключаем, что наличие звука в статистической модели ( $v_{\Phi}^2 > 0$ ) определяется не взаимодействием между ячейками, а самодействием внутри одной элементарной ячейки.

Перейдем к вопросу о соотношении между микро- и макросмещениями при распространении звука в статистическом континууме, описывающем кристалл. Рассматривая звук как термодинамический процесс, мы должны за смещения принять соответствующие изменения удельного объема (IV.15), приходящегося на одну частицу, т. е. величину  $a^*b^*c^*$ . В случае распространения продольной волны вдоль  $a^*$

$$a^* = a_0^* + u_x^* \exp(ikx - i\omega t). \quad (\text{IV.19})$$

С точки зрения упругого континуума тот же процесс описывается уравнениями

$$\rho \ddot{u}_x = -\partial p / \partial x, \quad \ddot{u}_x = \ddot{u}_x \exp(ikx - i\omega t), \quad (\text{IV.20})$$

где  $p$  в нашей модели должно быть отождествлено с (IV.12). В этой формуле  $\ddot{u}_x$  — макросмещения, в предыдущей формуле  $u_x^*$  — микросмещения. Учитывая, что

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial v} \frac{1}{a^*} \frac{\partial a^*}{\partial a} a^*b^*c^*, \quad (\text{IV.21})$$

формулы для удельного объема  $v$ , для макро- и микросмещений, а также термодинамическое определение скорости звука, имеем

$$\rho \omega^2 \ddot{u}_x = \frac{mv_{\Phi}^2}{v} (-ik) \frac{u_x^*}{a^*}; \quad (\text{IV.22})$$

в результате приходим к уравнению

$$|\ddot{u}_x| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{\lambda}{a^*} \right| \cdot |u_x^*|, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (\text{IV.23})$$

отвечающему на поставленный вопрос о связи микро- и макросмещений. Амплитуды смещений упругого континуума превышают амплитуды смещений в статистической модели кристалла в  $\lambda/2\pi a^*$  раз. Полученный результат устраняет трудность динамической теории, рассмотренной в § 1.

### § 3. Механизм, скорость и затухание звука на основе временного уравнения для функции распределения

В случае звуковых волн малой амплитуды (линейное приближение) будем искать решение уравнений (I.10) в виде

$$f = f_0(r, v) + \varphi(r, v, t), \quad |\varphi| \ll f_0,$$

где  $f_0 = \rho_0(r) f_M(v^2)$  — функция распределения в отсутствие звуковых волн, воспроизводящая периодическую структуру кристалла,  $f_M(v^2)$  — максвелловская функция распределения скоростей. Для возмущения  $\varphi(r, v, t)$  имеем уравнение

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \nabla_r \varphi - \frac{1}{m} \nabla_r U \{ \varphi \} \nabla_v f_0 - \frac{1}{m} \nabla_r U \{ f_0 \} \nabla_v \varphi = 0, \quad (\text{IV.24})$$

где

$$U \{ \varphi \} = \int K(|r - r'|) \varphi(r', v, t) dr' dv,$$

$$U \{ f_0 \} = \int K(|r - r'|) f_0(r', v) dr' dv.$$

Молекулярный потенциал возмущения  $U \{ \varphi \}$  представим в виде суммы самовоздействия и взаимодействия:

$$\begin{aligned} U \{ \varphi \} = & \int_{(abc)} K(|r - r'|) \varphi(r', v, t) dr' dv + \\ & + \sum_{h, k, l} \int_{(abc)} K(|r - (ha + kb + lc) - r'|) \times \\ & \times \varphi(r' + ha + kb + lc, v, t) dr' dv, \end{aligned} \quad (\text{IV.25})$$

$$U \{ \varphi \} = U^{(1)} \{ \varphi \} + U^{(2)} \{ \varphi \}.$$

Микронеоднородности кристалла входят в уравнение для  $\varphi$  посредством функций  $\sum_{h, k, l} K(|r - (ha + kb + lc)|)$ ,  $K(|r - r'|)$ ,  $\rho_0(r)$ .

Ограничимся малыми пространственными изменениями в звуковом поле по сравнению с микронеоднородностями кристалла:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\varphi \partial x_\alpha} \ll \frac{\partial K}{K \partial x_\alpha}, \quad \frac{\partial \rho_0}{\rho_0 \partial x_\alpha}, \quad \frac{\partial \Sigma'}{\Sigma' \partial x_\alpha}, \quad x_\alpha \in \Delta, \quad (\text{IV.26}) \\ \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2} < \Delta < abc, \end{aligned}$$

и усредненной информацией о поведении решения по области  $\Delta$ . При усреднении последний член в уравнении для  $\varphi$   $U \{ f_0 \}$  дает практически исчезающий результат:

$$\frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \nabla_{r+s} U \{ f_0(r+s) \} \nabla_v \varphi(r+s, v, t) ds = 0, \quad (\text{IV.27})$$

ввиду сформулированных условий и наличия симметрии функции

$U(r)$  вблизи узла. Операция усреднения практически не изменяет величины производных возмущения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \frac{\partial \varphi}{\partial t}(r+s, v, t) ds &= \frac{\partial \varphi}{\partial t}(r, v, t), \\ \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \frac{\partial \varphi}{\partial x_{\alpha}}(r+s, v, t) ds &= \frac{\partial \varphi}{\partial x_{\alpha}}(r, v, t). \end{aligned} \quad (\text{IV.28})$$

Остальные члены, фигурирующие в исходном уравнении, после усреднения дадут

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \nabla_{r+s} U^{(1), (2)} \{ \varphi(r+s, t) \} \rho_0(r+s) ds &= \\ &= \nabla_r U^{(1), (2)} \{ \varphi(r, t) \} \tilde{\rho}_0, \quad (\text{IV.29}) \\ \tilde{\rho}_0 &= \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \rho_0(r+s) ds = \frac{1}{\Delta} \int_{(abc)} \rho_0(r) dr = \text{const.} \end{aligned}$$

При тех же ограничениях молекулярный потенциал возмущения  $U\{\varphi\} = U^{(1)} + U^{(2)}$  приобретает вид

$$\begin{aligned} U\{\varphi(r, t)\} &= \sigma(k) \int_{\infty} \varphi(r, v, t) dv + \\ &+ \sum'_{h, k, l} \int_{\infty} \varphi(r+ha+kb+lc, v, t) dv K(|r-(ha+kb+lc)|) \cdot \widetilde{abc}, \end{aligned} \quad (\text{IV.30})$$

где  $\widetilde{abc}$  — область сосредоточения функции  $\varphi$  в узлах, а  $\sigma(k)$  дается (I.56).

Используя результат усреднения отдельных членов и представляя возмущение в виде разложения типа Фурье по координатам:

$$\varphi(r, v, t) = \sum_k \varphi_k(v, t) e^{ikr},$$

получаем уравнение

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + ikv\varphi_k - \frac{\tilde{\rho}_0}{m} ik [\sigma(k) + \sigma(k_x, k_y, k_z)] \int_{(\infty)} \varphi_k dv \cdot \nabla_v f_M = 0,$$

$$\begin{aligned} \sigma(k_x, k_y, k_z) &= \\ &= \widetilde{abc} \sum'_{h, k, l} K(|ha+kb+lc|) 2 \cos k_x ha \cdot 2 \cos k_y kb \cdot 2 \cos k_z lc. \end{aligned} \quad (\text{IV.31})$$

Применяя в свою очередь к этому уравнению преобразования

Лапласа по времени, получим решение для волн, распространяющихся вдоль оси  $x$ , в следующем виде:

$$\rho_k(t) = \int_{(\infty)} \varphi_k(v, t) dv = \frac{1}{2\pi} \int \rho_k(z) e^{izt} dz,$$

$$\rho_k(z) = \frac{1}{\varepsilon_+(k, z)} \frac{1}{i} \int \frac{q_k(v, 0)}{kv - z} dv; \quad (IV.32)$$

$$\varepsilon_+(k, z) = 1 - \frac{\tilde{\rho}_0}{m} [\sigma(k) + \sigma(k, 0, 0)] \int \frac{k \partial_v f_M}{kv - z} dv$$

$$(k \equiv k_x, \quad v \equiv v_x);$$

здесь

$$q_k(v, 0) = \varphi_k(v, t)|_{t=0}, \quad f_M = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta}\right), \quad \text{Im } z < 0.$$

Скорость и затухание волн определяются дисперсионным уравнением  $\varepsilon(k, z) = 0$ . Для решения дисперсионного уравнения введем предположение (оправдывающееся результатом вычислений), что существует полюс, близко расположенный к действительной оси

$$z = kx_0(k) +iky_0(k), \quad y(k)|_{k \rightarrow 0} \rightarrow 0; \quad (IV.33)$$

физически это предположение соответствует малому затуханию волн.

Разложим дисперсионное уравнение в ряд по  $|y_0|$  и, используя формулу Племеля — Привалова, получим

$$1 - \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \left\{ \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - x_0} dv + \pi i \partial_{x_0} f_M(x_0) + \right. \\ \left. + iy_0 \left[ \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - x_0} dv + \pi i \partial_{x_0} f_M^2(x_0) \right] + O(y_0) \right\} = 0. \quad (IV.34)$$

Разделяя действительную и мнимую части, получим

$$1 - \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - x_0} dv = 0, \quad (IV.35)$$

$$\pi \partial_{x_0} f_M(x_0) + y_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - x_0} dv = 0, \quad \tilde{\sigma}(k) = \sigma(k) \sigma + (k, 0, 0).$$

Эти уравнения дают возможность определить  $x_0 = \omega/k$  и  $y_0$ . В приближении достаточно больших фазовых скоростей волн по

сравнению с тепловой скоростью частиц имеем

$$\begin{aligned}
 1 + \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}(v)}{1 - v/x_0} dv = \\
 = 1 + \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \int_{-\infty}^{\infty} \partial_v f_{\mathbf{M}}(v) \left[ 1 + \frac{v}{x_0} + \left( \frac{v}{x_0} \right)^2 + \dots \right] dv \quad (\text{IV.36})
 \end{aligned}$$

или, удерживая первые члены разложения,

$$\begin{aligned}
 1 - \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \left( \frac{1}{x_0^2} + \frac{3 \langle v^2 \rangle}{x_0^4} + \dots \right), \quad (\text{IV.37}) \\
 x_0^2 = \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 + \frac{3\theta}{m} + \dots
 \end{aligned}$$

Находим основную формулу для фазовой скорости волн в кристаллической среде:

$$v_{\Phi}^2 \equiv \left( \frac{\omega}{k} \right)^2 = \frac{1}{m} [\sigma(k) + \sigma(k, 0, 0)] \tilde{\rho}_0 + \frac{3\theta}{m} + \dots, \quad (\text{IV.38})$$

здесь

$$\sigma(k) = 4\pi \int K(R) \frac{\sin kR}{kR} R^2 dR,$$

$$\tilde{\rho}_0 = \frac{1}{\Delta} \int_{(abc)} \rho_0(r) dr,$$

$$\sigma(k, 0, 0) = \widetilde{abc} \sum'_{h,k,l} K(|ha + kb + lc|) \cdot 8 \cos kha.$$

Без предположения о значительной фазовой скорости волн та часть дисперсионного уравнения, которая определяет фазовую скорость, выражается через специальную функцию  $I(\omega/kv_T)$ .

Полагая

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - \omega/q} dv = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - \omega/q + i\alpha} dv + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - \omega/q - i\alpha} dv \right)$$

и дважды интегрируя по частям, имеем

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - \omega/q + i\alpha} dv &= \int_{-\infty}^{\infty} \partial_v f_{\mathbf{M}} dv \int_{\{0\}}^{\{T\}} e^{i(v - \omega/q + i\alpha)t} dt (-i) = \\
 &= \int_0^T e^{i(-\omega/q + i\alpha)t} dt \int_0^{\infty} \partial_v f_{\mathbf{M}} e^{i\omega t} dv (-i) = (-i)^2 \int_0^T e^{i(-\omega/q + i\alpha)t} t e^{-\theta t^2/2m} dt.
 \end{aligned}$$

Проводя аналогичные преобразования для второго интеграла и устремляя  $T \rightarrow \infty$  и  $\alpha \rightarrow 0$ , получаем

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - \omega/q} dv = - \int_0^{\infty} t e^{-\theta t^2/2m} \cos \frac{\omega}{q} t dt = - \frac{2m}{\theta} \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos vx dx.$$

В итоге дисперсионное уравнение, определяющее фазовую скорость волн, приобретает вид

$$\frac{\theta}{2\tilde{\sigma}(k)\tilde{\rho}_0} = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos vx dx \equiv I(v), \quad v = \frac{\omega}{k v_T}, \quad v_T = \left(\frac{\theta}{2m}\right)^{1/2}. \quad (\text{IV.39})$$

Асимптотическое поведение функции  $I(v)$  таково (рис. 6):

$$I(v) = - \frac{1}{v^2} \int_0^{\infty} z^2 e^{-z^2/v^2} \cos z dz \Big|_{v \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{v^2},$$

$$I(v) = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \left(1 - \frac{v^2 x^2}{2} + \dots\right) dx \Big|_{v \rightarrow 0} \rightarrow \frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{2} - 1\right).$$

Для случая  $v \gg 1$  дисперсионное уравнение приводит к прежнему

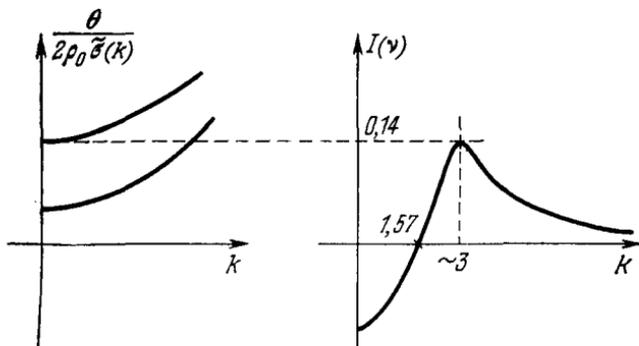


Рис. 6.

значению величины фазовой скорости волн

$$v_{\Phi}^2 \rightarrow \frac{\tilde{\sigma}(k)\tilde{\rho}_0}{m} + \frac{3\theta}{m} + \dots$$

Общий вид зависимости  $\omega(k)$  характеризуется максимальным значением волнового числа, частоты и наличием двух ветвей: верхней и нижней. Обе ветви смыкаются в точке  $k = k_{\max}$  (рис. 7).

Перейдем к рассмотрению затухания акустических волн, величина которого определяется мнимой частью комплексной

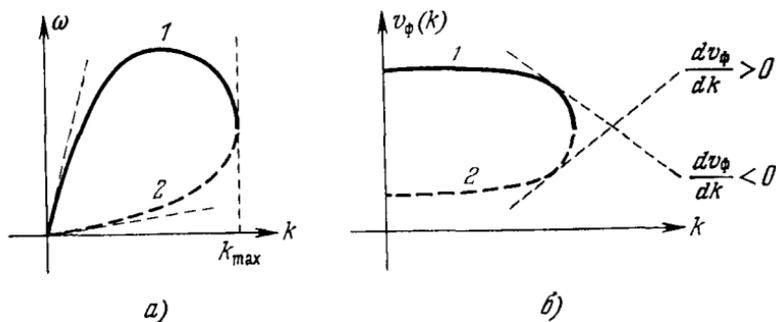


Рис. 7.

переменной  $z = kx_0(k) + iky_0(k)$ , введенной формулой (IV.34); величина  $y_0$  входит и в уравнение

$$\pi \partial_{x_0} f_M(x_0) + y_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - x_0} dv = 0.$$

Продифференцируем по  $k$  дисперсионное уравнение для фазовой скорости акустических волн:

$$1 - \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - x_0} dv = 0,$$

$$-\frac{\tilde{\sigma}'(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - x_0} dv - \frac{\tilde{\sigma}(k)}{m} \tilde{\rho}_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{(v - x_0)^2} dv \frac{dx_0}{dk} = 0.$$

Интегрирование по частям дает

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{(v - x_0)^2} dv = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - x_0} dv,$$

так как

$$f_M \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Учитывая, что

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - x_0} dv = -\frac{1}{y_0} \pi \partial_{x_0} f_M(x_0),$$

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - x_0} dv = \frac{2m}{\theta} I(v), \quad v = \frac{\omega}{kv_T},$$

получаем выражение для интересующей нас величины

$$y_0 = \pi \frac{\tilde{\sigma}(k)}{\tilde{\sigma}'(k)} \frac{\theta}{2mI(v)} \partial_{x_0} f_M(x_0) \frac{dx_0}{dk}. \quad (\text{IV.40})$$

Перейдем от величины  $y_0$  к коэффициенту затухания амплитуды волн  $\gamma$ . Ввиду того, что

$$e^{pt} \propto e^{-izt} \propto e^{\pm ikx_0 + ky_0 t} \propto e^{\pm i\omega t - \gamma t}, \quad \gamma > 0,$$

закключаем, что

$$\gamma = -ky_0, \quad x_0 = \omega/k = v_\Phi.$$

Таким образом, формула для коэффициента затухания имеет вид

$$\gamma = -\pi \frac{k\tilde{\sigma}(k)}{\tilde{\sigma}'(k)} \frac{\theta}{2mI(v_\Phi/v_T)} \partial_{v_\Phi} f_M\left(\frac{v_\Phi}{v_T}\right) \frac{dv_\Phi}{dk}. \quad (\text{IV.41})$$

Знак коэффициента затухания зависит от знака производной  $dv_\Phi/dk$ .

Для двух ветвей дисперсионной кривой — «верхней» и «нижней» — этот знак различен. Верхняя ветвь соответствует затуханию, нижняя — возрастанию амплитуды волн с течением времени.

Таким образом, задача с начальными условиями, в которых предполагается отсутствие в среде акустического поля для всех времен, меньших начального (для  $t < 0$ ), и существование акустических волн для  $t \geq 0$  (задача Коши), приводит к распространению волн и их затуханию с течением времени.

Мы увидим ниже (см. главу 9, § 2), что другая задача — о существовании и свойствах акустических шумов, имеющих место для любых  $t$ :

$$-\infty < t < +\infty,$$

приводит к возрастанию амплитуд волн с течением времени для  $t < 0$ .

Вычислим коэффициент затухания волн в задаче Коши для случая, когда фазовая скорость волн превышает тепловую скорость частиц ( $v_\Phi \gg v_T$ ). Если воспользуемся асимптотическим поведением функции  $I(v)$ :

$$I(v) \Big|_{v \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{v^2} = \frac{v_T^2}{v_\Phi^2},$$

то дисперсионное уравнение дает  $v_\Phi^3 \rightarrow \frac{\tilde{\sigma}(k) \tilde{\rho}_0}{m} + \frac{3\theta}{m} + \dots$

Для коэффициента затухания получаем

$$\gamma = -k \frac{\pi}{2} v_\Phi^3 \partial_{v_\Phi} f_M\left(\frac{v_\Phi}{v_T}\right) > 0. \quad (\text{IV.42})$$

Ввиду наличия максвелловской функции распределения, зависящей от отношения  $v_{\phi}/v_T \gg 1$ , декремент затухания  $\gamma$  оказался малым по абсолютной величине и существенно зависящим от волнового числа  $k$ .

Механизм распространения звука в статистической модели кристалла отличен от динамической теории, он связан: 1) с изменением нормировки вероятности местоположения на ячейку, так как

$$\partial_t \int_{(abc)(\infty)} \int \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} > 0,$$

2) с наличием энергии самовоздействия в окрестности узла, которая должна превышать энергию взаимодействия между ячейками кристалла

$$4\pi \int K(R) \frac{\sin kR}{kR} R^2 dR + \widetilde{abc} \sum'_{h, k, l} K(|ha + kb + lc|) 8 \cos kha > 0.$$

При этом кинетическая и термодинамическая скорости звука совпадают друг с другом, если отождествить объемы  $\Delta$  и  $\widetilde{abc}$  и пренебречь дисперсией для длинных волн.

Перейдем к рассмотрению эффектов модуляции акустических волн периодической структурой кристалла.

#### § 4. Пространственная модуляция акустических волн периодической структурой кристалла

В нелокально-статистической теории кристалла, при наличии акустических волн, происходит с течением времени изменение нормировки вероятности местоположения атомов в произвольном объеме около каждого узла решетки, период же кристалла при этом остается неизменным. В этом параграфе указанная теория развивается в направлении решения следующих вопросов.

1. Приводит ли периодическая структура кристаллов к модуляции статистических функций распределения, описывающих акустические волны, типа

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{n_1 n_2 n_3} b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, \omega) e^{i(n_1 a_1 x + n_2 a_2 y + n_3 a_3 z)}$$

$$\left( a_i = \frac{2\pi}{d_i}, \quad i = 1, 2, 3 \right),$$

где  $d_i$  — ребра элементарной ячейки кристалла? Острота поставленного вопроса определяется тем, что предполагаемое решение изменяет нормировку вероятности местоположения атомов внутри объемов, меньших элементарной ячейки, поэтому оно выводит

нас из класса решений дельтаобразного типа:

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \propto \sum_{s=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s(t)),$$

в связи с чем классическая динамическая теория колебаний решетки не имеет модулированных решений указанного вида.

2. Модулированное волновое образование  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  имеет право на существование, если оно сохраняет свою индивидуальность с течением времени, т. е. если существует одна фазовая скорость для всего образования в целом. Выводится ли это свойство из общих нелокально-статистических законов сохранения?

3. Возникновение модуляции акустических волн обусловлено параметрическим воздействием трехмерной периодической структуры кристалла на статистические уравнения акустического поля. В случае наличия анизотропии внутри элементарных ячеек естественно ожидать появления асимметрии акустического поля в плоскостях, перпендикулярных направлению распространения волн. Приводит ли эта асимметрия к моменту сил, действующих на атомы кристалла со стороны акустического поля, т. е. к существованию акустического спина как важной характеристики воздействия акустических волн на кристалл?

Обозначая через  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  стационарную функцию распределения атомов в невозмущенном кристалле и через  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  — изменение, обусловленное наличием звукового поля, имеем в качестве исходного уравнения для определения этих функций систему

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} U \{f_0\} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{v}} - \\ - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} U \{\varphi\} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} U \{\varphi\} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{v}} = 0, \end{aligned}$$

$$U \{\varphi\} = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v} + U^{\text{вн}}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{IV.43})$$

$$U \{f_0\} = C \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}',$$

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r}) f_M(v^2), \quad \rho(\mathbf{r}) = C \exp\left(-\frac{U \{f_0\}}{\theta}\right).$$

Здесь  $f_M(v^2)$  — стационарная максвелловская функция распределения скоростей,  $U^{\text{вн}}(\mathbf{r}, t)$  — потенциал внешнего источника звукового поля.

Решение для  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  и  $U \{f_0\}$  получено в главе II и дается формулами (II.36) и (II.37). Функции  $\rho(\mathbf{r})$  и  $U \{f_0\}$  являются пространственно-периодическими и поэтому могут быть разложены

в ряд Фурье:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_l a_l e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{r}}, \quad U\{f_0\} = \sum_l a_l \sigma_{f_0}(\mathbf{l}a) e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{r}},$$

$$a_l = \left( \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 \alpha^{-1} \exp\left(-\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle \frac{l_{\alpha}^2}{d_{\alpha}^2}\right),$$

$$\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3), \quad (IV.44)$$

$$\sigma_{f_0}(\mathbf{l}a) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{i\mathbf{l}a(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{r}',$$

$$\mathbf{l}a = \left( \frac{2\pi l_1}{d_1}, \frac{2\pi l_2}{d_2}, \frac{2\pi l_3}{d_3} \right).$$

Здесь учтено, что решение получено при условии малости сил самовоздействия.

Применяя к нелинейному уравнению для  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  преобразование Лапласа относительно переменной  $t$ , преобразование Фурье относительно переменных  $x_{\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) и используя теорему о свертке, получим уравнение

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) = \frac{1}{m} \sum_l a_l U(\mathbf{k} - \mathbf{l}a, p) \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{l}a) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} +$$

$$+ \frac{1}{m} \sum_l a_l \sigma_{f_0}(\mathbf{l}a) \frac{i\mathbf{l}a \nabla_{\mathbf{v}} \varphi(\mathbf{k} - \mathbf{l}a, \mathbf{v}, p)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} +$$

$$+ \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} \nabla_{\mathbf{v}} \varphi(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p),$$

$$(IV.45)$$

$$U(\mathbf{k}, p) = \sigma(|\mathbf{k}|) \int_{(\infty)} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) d\mathbf{v} + U^{\text{н}}(\mathbf{k}, p),$$

$$\sigma(|\mathbf{k}|) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{r}'.$$

Представим функцию  $U^{\text{н}}(\mathbf{r}, p)$ , описывающую источник, и искомую функцию распределения  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, p)$  в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} U^{\text{н}}(\mathbf{r}, p) \\ \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, p) \end{pmatrix} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{n_1 n_2 n_3} \begin{pmatrix} U_{n_1 n_2 n_3}^{\text{н}}(p) \\ b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, p) \end{pmatrix} \cdot e^{i(n_1 a_1 x + n_2 a_2 y + n_3 a_3 z)}. \quad (IV.46)$$

Переходя к фурье-компонентам и производя линеаризацию уравнения относительно  $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$ , для определения амплитуд

$b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, p)$  получим уравнение

$$\begin{aligned}
 b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, p) = & \frac{1}{m} \sum_l a_l U_{n-l}^n(p) \frac{i(na - \tilde{\mathbf{k}} - l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i(na - \tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{v}} + \\
 & + \frac{1}{m} \sum_l a_l \int_{(\infty)} b_{n-l}(\mathbf{v}, p) d\mathbf{v} \cdot \sigma(|na - \tilde{\mathbf{k}} - l\mathbf{a}|) \times \\
 & \times \frac{i(na - \mathbf{k} - l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i(na - \mathbf{k}) \mathbf{v}} + \\
 & + \frac{1}{m} \sum_l a_l \sigma_{f_0}(|l\mathbf{a}|) \frac{i l \mathbf{a} \nabla_{\mathbf{v}} b_{n-l}(\mathbf{v}, p)}{p + i(na - \mathbf{k}) \mathbf{v}}. \quad (\text{IV.47})
 \end{aligned}$$

Парное взаимодействие между атомами кристалла входит через коэффициенты  $\sigma$  и  $\sigma_{f_0}$  и дается формулой (I.12). Фигурирующая в (I.12) величина  $r_1$  — условная величина, численное значение которой близко к корню уравнения  $K(|r_1|) = 0$ . Перед второй формулой (I.12) можно ввести коэффициент  $\varepsilon$ , указывая на относительную малость взаимодействия в окрестности потенциальной ямы, в сравнении с силами отталкивания при близких взаимодействиях частиц.

При решении уравнения (IV.47) примем следующие упрощения:

1. Будем отыскивать решения в виде ряда по малому параметру  $\varepsilon$

$$b_n = b_n^{(0)} + \varepsilon b_n^{(1)} + \varepsilon^2 b_n^{(2)} + \dots \quad (\text{IV.48})$$

и удержим в дальнейшем только первый член. Это не будет находиться в конфликте с ролью потенциальных ям в образовании стационарных решений, так как применяемое разложение используется только для акустических возмущений. По той же причине в механизме образования акустических волн играет роль эффект самовоздействия.

2. Поставим задачу определить только амплитуды  $b_{n_1 n_2 n_3}$  с  $n_2 = n_3 = 0$ , ограничиваясь минимальной информацией о других членах в виде условий симметрии (антисимметрии) относительно индексов  $n_2, n_3$ . Для указанной группы имеет место равенство

$$\int_{(\infty)} \frac{i(na - \mathbf{k} - l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i(na - \mathbf{k}) \mathbf{v}} d\mathbf{v} = \int_{(\infty)} \frac{i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1 - l_1 a_1) \partial_{v_x} f_M(v_x^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_x} dv_x \quad (\text{VI.49})$$

$$(\tilde{f}_M(v_x^2)) = \iint_{(\infty)} f_M(v^2) dv_y dv_z.$$

3. Распорядимся свойствами внешнего источника, приписав компонентам  $U_{n-1}^{\text{н}}$  специальные условия асимметрии относительно индексов  $n_2$  и  $n_3$ , физический смысл которых выясним позднее:

$$U_{n_1-l_1, l_2, l_3}^{\text{н}} = -U_{n_1-l_1, -l_2, l_3}^{\text{н}}; \quad U_{n_1-l_1, l_2, l_3}^{\text{н}} = -U_{n_1-l_1, l_2, -l_3}^{\text{н}}.$$

Естественно, что коэффициенты  $b_{n_1 n_2 n_3}$  должны также удовлетворять подобным условиям. Это ведет к исключению следующих членов:

$$\sum_{l_2 l_3}^{\text{н}} a_{l_1 l_2 l_3} \int_{(\infty)} b_{(n, 0, 0) - (l_1, l_2, l_3)}(\mathbf{v}, p) d\mathbf{v} \cdot \sigma(|\dots l_2 a_2, l_3 a_3|) = 0$$

$$\left( a_{l_1 l_2 l_3} = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \cdot \prod_{\alpha=1}^3 \exp\left(-\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle \frac{l_{\alpha}^2}{d_{\alpha}^2}\right) \right).$$

4. В обычных условиях существования кристаллов  $\langle x_{\alpha}^2 \rangle \ll d_{\alpha}^2$  для достаточно большого числа членов, вследствие изменения  $l_1$ , можно считать

$$a_{l_1 00} \approx a_{000} = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \equiv \frac{1}{d^3}.$$

Учитывая эти условия для определения  $b_{n_{100}}$ , получаем уравнение

$$\int_{(\infty)} b_{n_{100}} d\mathbf{v} -$$

$$- \frac{1}{md^3} \sum_{s_1} \int_{(\infty)} b_{s_{100}} d\mathbf{v} \cdot \sigma(|s_1 a_1 - \tilde{k}_1|) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(s_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_{v_x} f_{\text{М}}(v_x^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_x} dv_x =$$

$$= \frac{1}{md^3} \sum_{s_1} U_{s_{100}}^{\text{н}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(s_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_{v_x} \tilde{f}_{\text{М}}(v_x^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_x} dv_x; \quad (\text{IV.50})$$

решение которого есть

$$\tilde{b}_{n_{100}}(v_x, p) = \frac{1}{md^3} \frac{1}{\varepsilon(\tilde{k}_1, p)} \left[ \sum_{s_1} U_{s_{100}}^{\text{н}}(p) \frac{i(s_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_{v_x} f_{\text{М}}(v_x^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_x} \right]$$

$$(\tilde{b}_{n_{100}}(v_x, p) = \int_{(\infty)} b_{n_{100}}(\mathbf{v}, p) dv_y dv_z). \quad (\text{IV.51})$$

Функция  $\varepsilon(\tilde{k}_1, p)$ , являющаяся аналогом коэффициента диэлектрической проницаемости, имеет вид

$$\varepsilon(\tilde{k}_1, p) = 1 - \frac{1}{md^3} \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_{v_x} f_{\text{М}}(v_x^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_x} dv_x. \quad (\text{IV.52})$$

Полученное решение указывает на существование модуляции амплитуды акустических волн периодической структурой кристалла. Оно приводит к существованию одного дисперсионного уравнения для всех  $n_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  вида  $\varepsilon(\vec{k}_1, p) = 0$ , что оправдывает предположение о модулированных волнах, сохраняющих свою индивидуальность в процессе распространения.

Перейдем к уяснению смысла асимметрии коэффициентов  $b_{n_1 n_2 n_3}$  относительно индексов  $n_2$  и  $n_3$ , которая определила решение задачи о существовании модуляционных акустических волн в кристаллах:

$$b_{n_1 n_2 n_3} = -b_{n_1 -n_2 n_3},$$

$$b_{n_1 n_2 n_3} = -b_{n_1 n_2 -n_3}.$$

При этом необходимо допустить, что  $b_{n_1 n_2 n_3} \neq 0$  при  $n_2, n_3 \neq 0$ , так как в противном случае трехмерная периодичность сведена была бы к одномерной, что неприемлемо при рассмотрении волн в троякопериодическом кристалле.

Рассмотрим изменение плотности вероятности местоположения частиц, вызываемое модулированной звуковой волной, движущейся вдоль оси  $x$ :

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(1)}(r, p) = & \int_{(\infty)} \varphi(r, v, p) dv = e^{-i\vec{k}_1 x} \sum_{n_1} \left( \int_{(\infty)} b_{n_1, 00} dv \right) e^{in_1 a_1 x} + \\ & + e^{-i k_1 x} (-4) \sum_{n_1 |n_2| |n_3|} \left( \int_{(\infty)} b_{n_1 |n_2| |n_3|} dv \right) e^{in_1 a_1 x} \sin |n_2| a_2 y \sin |n_3| a_3 z. \end{aligned} \quad (IV.53)$$

Образует среднее значение момента сил внутри элементарной ячейки кристалла, возникающего, возможно, под влиянием акустической волны.

В линейном приближении

$$\langle N(p) \rangle_x = \int_{(d_1 d_2)} ([r F_0]_x \delta\rho^{(1)} + [r \delta F^{(1)}]_x \rho_0) dr_{\perp}, \quad (IV.54)$$

где сила  $F_0 + \delta F^{(1)}$  описывает молекулярное поле в стационарном состоянии кристалла с поправкой, вносимой акустической волной:

$$F_0 = -\nabla_r \int K(|r - r'|) \rho_0(r') dr', \quad (IV.55)$$

$$\delta F^{(1)} = -\nabla_r \int K(|r - r'|) \delta\rho^{(1)}(r', p) dr' + \delta F^{(1)}.$$

Описание потенциальной ямы гармоническим приближением дает

$$\int_{(d_2 d_3)} [rF'_0]_x \delta\rho^{(1)} dr_{\perp} =$$

$$= e^{-i\tilde{k}_1 x} (-4) \sum_{n_1 | n_2 | n_3} \left( \int_{(\infty)} b_{n_1 | n_2 | n_3} (v_1 p) dv \right) \times$$

$$\times e^{in_1 a_1 x} (\kappa_2 - \kappa_3) \int_{(d_2 d_3)} yz \sin(|n_2| a_2 y) \cdot \sin(|n_3| a_3 z) dy dz \neq 0, \quad (\text{IV.56})$$

здесь  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$  — упругие постоянные, характеризующие потенциальную яму в направлении  $y$  и  $z$ .

Второй член

$$\int_{(d_2 d_3)} [r\delta F^{(1)}]_x \rho_0 dr_{\perp}$$

выражается более сложно, но он также отличен от нуля и не компенсирует первый член.

В итоге условие асимметрии коэффициентов  $b_{n_1 n_2 n_3}$  приводит к наличию момента сил, действующего на облако распределения вероятности частиц внутри каждой элементарной ячейки кристалла.

Естественно, что указанный момент определяет момент количества движения внутри ячеек, поэтому можно говорить о существовании акустического спина, который вызывается и переносится звуковой волной. В следующем (втором) приближении относительно амплитуд волн нужно ожидать стационарной составляющей акустического спина, по аналогии с наличием акустического ветра (см. гл. V) в кристаллах.

Перейдем к анализу дисперсионного уравнения волн (IV.53). Вводя обозначения

$$p = -iz \quad (\text{Re } p > 0, \quad \text{Im } z < 0),$$

$$z = \omega - i\gamma = (n_1 a_1 - \tilde{k}_1) x_0 - i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) y_0 (n_1),$$

где  $x_0$  и  $y_0$  — действительные величины, вычислим интеграл. Следуя предыдущему параграфу, предполагая малость коэффициента затухания и используя теорему Племеля — Привалова, получим

$$1 - \frac{1}{m d^3} \sum_{n_1} \sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) \left\{ \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_{\mathbf{M}}}{v - x_0} dv + \pi i \partial_{x_0} f_{\mathbf{M}}(x_0) - \right.$$

$$\left. - i y_0 \left[ \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_{\mathbf{M}}}{v - x_0} dv + \pi i \partial_{x_0}^2 f_{\mathbf{M}}(x_0) \right] + \dots \right\} = 0, \quad (\text{IV.57})$$

откуда для действительной и мнимой частей имеем

$$1 - \frac{1}{md^3} \sum_{n_1} \sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_{v_x} \tilde{f}_M(v_x^2)}{v - x_0} dv_x = 0, \quad (IV.58)$$

$$\pi \partial_{x_0} \tilde{f}_M(x_0) + y_0 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_{v_x}^2 \tilde{f}_M}{v - x_0} dv_x = 0.$$

Для определения фазовой скорости волн ( $v_\Phi \equiv \omega/\tilde{k}_1$ ) получаем уравнение

$$1 - \frac{2}{\theta d^3} \sum_{n_1} \sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) I(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) = 0, \quad (IV.59)$$

где

$$I(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos v_{n_1} x dx,$$

$$v_{n_1} = \frac{\omega}{(n_1 a_1 - \tilde{k}_1) v_T}, \quad v_T = \left( \frac{\theta}{2m} \right)^{1/2}.$$

Из уравнения (IV.57), содержащего  $y_0$ , определяется величина коэффициента затухания

$$\gamma = \pi \frac{k_{n_1} \sigma(k_{n_1})}{\sigma'(k_{n_1})} \frac{\theta}{I(\omega/k_{n_1} v_T)} \partial \tilde{f}_M \left( \frac{\omega^2}{k_{n_1}^2 v_T^2} \right) \frac{\partial}{\partial \tilde{k}_1} \left( \frac{\omega}{k_{n_1} v_T} \right) \quad (k_{n_1} = n_1 a_1 - \tilde{k}_1). \quad (IV.60)$$

1. Формула для фазовой скорости указывает на независимость от номера гармоники  $n_1$ , в то время как величина коэффициента затухания  $\gamma(k_{n_1})$  оказывается функцией  $n_1$ . Введение  $\gamma$  связано с новым моментом по сравнению с частотой  $\omega$  — с аналитическим продолжением функции, определенной на действительной оси, в комплексную плоскость. Коэффициент затухания оказался экспоненциально малой величиной для всех случаев, в которых  $|\omega/k_{n_1} v_T| > 1$ .

2. Как видно из дисперсионного уравнения, частота  $\omega$  является периодической функцией волнового числа  $\tilde{k}_1$  с периодом, равным  $2\pi/d_1$ . Известно, что в подобных случаях для получения различных независимых решений достаточно ограничиться изменением  $\tilde{k}_1$  в интервале  $-\pi/2 \leq \tilde{k}_1 \leq \pi/d_1$ . Заметим, что поскольку силы отталкивания монотонно убывают, то

$$\sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) < \sigma(|a_1 - \tilde{k}_1|)$$

для всех  $n_1 > 1$ . Если учесть два первых члена суммы в дисперсионном уравнении, то кривая зависимости  $\omega$  от  $\tilde{k}_1$  зеркально-сим-

метрична относительно середины интервала  $2\pi/d_1$  и проходит через точку  $\omega = 0$ ,  $\tilde{k}_1 = 0$ .

В случае, когда величина  $\pi/d_1$  меньше максимально возможного значения волнового числа  $|\tilde{k}_{\max}|$ , определяемого дисперсионным уравнением, волновые числа заполняют весь промежуток  $-\pi/d_1 \leq \tilde{k}_1 \leq \pi/d_1$ . В обратном случае появляется «щель» в спектре значений  $\tilde{k}_1$ , внутри которой не существует акустических волн.

3. К следствиям дисперсионного уравнения относится наличие одной фазовой скорости распространения всего модулированного волнового образования:

$$e^{i\omega t - ikr} \sum_{n_1 n_2 n_3} b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, \omega) e^{i(n_1 a_1 x + n_2 a_2 y + n_3 a_3 z)} \quad (\text{IV.61})$$

в целом.

4. Удерживая в дисперсионном уравнении только первый член суммы

$$\frac{\theta d^3}{2\sigma |\tilde{k}_1|} = - \int_0^\infty x e^{-x^2} \cos vx \, dx = I(v), \quad (\text{IV.62})$$

$$v = \omega/\tilde{k}_1 v_T, \quad v_T = \sqrt{\theta/2m},$$

и учитывая, что  $\sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}_1|) < \sigma(|\tilde{k}_1|)$ , можно утверждать о существовании аморфного приближения для акустических волн в кристалле. При этом коэффициент затухания переходит в следующий:

$$\gamma = -\pi \frac{\tilde{k}_1 \sigma(|\tilde{k}_1|)}{\sigma'(|\tilde{k}_1|)} \frac{\theta}{2mI(v_\Phi/v_T)} \partial_{v_\Phi} \tilde{f}_M \left( \frac{v_\Phi^2}{v_T^2} \right) \frac{dv_\Phi}{d\tilde{k}_1}. \quad (\text{IV.63})$$

В случае больших фазовых скоростей по сравнению со средними тепловыми скоростями атомов и для одночленного приближения получаем прежний результат:

$$v_\Phi^2 = \frac{\sigma(|\tilde{k}_1|)}{m d^3} + \frac{3\theta}{m} + \dots,$$

$$\gamma = -k \frac{\pi}{2} v_\Phi^3 \partial_{v_\Phi} \tilde{f}_M (v_\Phi^2/v_T^2).$$

Новый механизм распространения звука в кристаллах характеризуется:

1) изменением нормировки вероятности местоположения атомов в окрестности узлов элементарной ячейки

$$\partial_t \int_{\Delta V(\infty)} \int \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} \neq 0, \quad \Delta V \geq \langle x_\alpha^2 \rangle^{3/2};$$

2) изменением объема, приходящегося на одну частицу. Размер элементарной ячейки кристалла при распространении звуковых волн не изменяется:

$$d_j = \text{const}, \quad j = 1, 2, 3;$$

объем, приходящийся на одну частицу,

$$v + \Delta v = \frac{d_1 d_2 d_3}{\int_{(\Omega)} (\rho_0 + \Delta \rho) dr}$$

изменяется при наличии волн, так как

$$\int_{(\Omega)} \Delta \rho dr \neq 0;$$

3) изменением объема всего тела при прохождении акустических волн. При заданном числе частиц  $N_{\text{част}} = \text{const}$  объем тела определяется степенью заполняемости элементарных ячеек

$$N_{\text{ич}} = \frac{N_{\text{част}}}{\int_{(\Omega)} (\rho_0 + \Delta \rho) \Delta r} \quad (V = N_{\text{ич}} d_1 d_2 d_3),$$

которая изменяется при наличии волн.

### § 1. Постановка проблемы и метод решения

Акустический ветер, сопровождающий распространение звука в газах и жидкостях, в принципе невозможен в обычном варианте динамической теории решетки из-за содержащегося в этой теории требования локализации атомов в районах около узлов кристаллической решетки. В нелокально-статистической теории кристалла имеет место новый механизм распространения звука, связанный с изменением нормировки вероятности в элементарных объемах, с течением времени, изменения же размеров элементарной ячейки при этом не происходит. Этот механизм является общим как для жидкостей, так и для кристаллов, поэтому естественно ожидать наличия акустического ветра и в кристаллах.

Возникают следующие задачи:

1. Доказать общность механизма распространения акустического поля в кристаллах и в средах с пространственно-однородным распределением частиц, прежде всего в рамках линейного приближения, и уяснить также различие в свойствах этого поля в обоих случаях.

2. Выяснить, сохраняется ли общность механизма распространения в кристаллах и в аморфных средах в нелинейной области и обеспечивает ли эта общность существование акустического ветра и в кристаллах. Определить его величину и зависимость от основных величин.

Теория волнового ветра для поверхностных волн и акустического ветра в однородных средах и в кристаллах вблизи температуры плавления или кристаллизации развивалась в ряде работ [17, 9].

Однако сильные ограничения, связанные с условием близости к температуре плавления, не давали возможности утверждать о наличии акустического ветра в обычных условиях существования кристаллов.

Обозначая через  $f_0(r, v)$  стационарную функцию распределения в невозмущенном кристалле и через  $\varphi(r, v, t)$  — изменение, обусловленное акустическим полем, имеем следующие исходные

---

\*) Расширенное изложение доклада на Всесоюзной акустической конференции [16].

уравнения для этих функций:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m} \frac{\partial U \{ \varphi \}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} - \frac{1}{m} \frac{\partial U \{ f_0 \}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{v}} -$$

$$- \frac{1}{m} \frac{\partial U \{ \varphi \}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{v}} = 0,$$

$$U \{ \varphi \} = \int K ( | \mathbf{r} - \mathbf{r}' | ) \varphi ( \mathbf{r}', \mathbf{v}, t ) d\mathbf{r}' d\mathbf{v} + U^H ( \mathbf{r}, t ),$$

$$U \{ f_0 \} = \int K ( | \mathbf{r} - \mathbf{r}' | ) f_0 ( \mathbf{r}', \mathbf{v} ) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}, \quad (\text{V.1})$$

$$f_0 ( \mathbf{r}, \mathbf{v} ) = \rho ( \mathbf{r} ) f_M ( v^2 ), \quad f_M = \left( \frac{m}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp \left( - \frac{mv^2}{2\theta} \right),$$

$$\rho ( \mathbf{r} ) = C \exp \left( - \frac{U \{ f_0 \}}{\theta} \right)$$

$$\left( U \{ f_0 \} = C \int K ( | \mathbf{r} - \mathbf{r}' | ) \exp \left( - \frac{U \{ f_0 \}}{\theta} \right) d\mathbf{r}' \right).$$

Здесь  $U^H ( \mathbf{r}, t )$  — внешний источник возбуждения акустического поля.

Структура кристаллов влияет на акустическое поле через модуляцию вероятности местоположения атомов и через модуляцию молекулярного потенциала. Последний член в уравнении для  $\varphi$  выражает нелинейность статистического происхождения, включая в себя производные функции распределения по скоростям.

Решение стационарной части уравнений для  $\rho ( \mathbf{r} )$  и  $f_M ( v^2 )$  получено в главе II и дается формулами (II.36) и (II.37). Ряды Фурье функций  $\rho ( \mathbf{r} )$  и  $U \{ f_0 \}$  таковы:

$$(\rho ( \mathbf{r} ), U \{ f_0 \}) = \left( \sum_l a_l e^{i l a r}, \sum_l a_l \sigma_{f_0} ( | l a | ) e^{i l a r} \right),$$

где

$$a_l = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 d_{\alpha}^{-1} \exp \left( - \frac{2\pi^2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle l_{\alpha}^2}{d_{\alpha}^2} \right),$$

$$\sigma_{f_0} ( | l a | ) = \int K ( | \mathbf{r} - \mathbf{r}' | ) e^{-l a (r-r')} d\mathbf{r}',$$

$$l a = \left( \frac{2\pi}{d_1} l_1, \frac{2\pi}{d_2} l_2, \frac{2\pi}{d_3} l_3 \right); \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

В выражениях  $\sigma_{f_0}$  и  $K ( \mathbf{r} )$  отражено, что эффект самовоздействия в образовании стационарной периодической структуры является малым в сравнении со взаимодействием атомов (см. гл. II). Применяя к уравнению (V.1) для  $\varphi ( \mathbf{r}, \mathbf{v}, t )$  преобразование Фурье для

переменной  $r$  и Лапласа относительно  $t$

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t) = \int_{(\infty)}^{\infty} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r},$$

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) = \int_0^{\infty} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t) e^{-pt} dp$$

и используя в обоих случаях теорему о свертке, получаем

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) = & \frac{1}{m} \sum_l a_l U(\mathbf{k} - l\mathbf{a}, p) \frac{i(\mathbf{k} - l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{M}}(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \\ & + \frac{1}{m} \sum_l a_l \sigma_{f_0}(|l\mathbf{a}|) \frac{i l \mathbf{a} \nabla_{\mathbf{v}} \varphi(\mathbf{k} - l\mathbf{a}, \mathbf{v}, p)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \\ & + \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{da}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}}, \quad (\text{V.2}) \\ U(\mathbf{k}, p) = & \sigma(|\mathbf{k}|) \int_{(\infty)} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) d\mathbf{v} + U^H(\mathbf{k}, p). \end{aligned}$$

Это уравнение содержит производные только по скоростям, оно также нелинейно и подлежит решению методом последовательных приближений.

Заметим, что форм-фактор взаимодействия  $\sigma(\mathbf{k})$  в отличие от  $\sigma_{f_0}(\mathbf{k})$  содержит полное взаимодействие между частицами, включающее учет взаимодействий на малых расстояниях:

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{k}) = & \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r}', \\ K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = & \begin{cases} \sum_{s \geq 1} \frac{G_s}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^s} e^{-\alpha_s |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leq r_1, \\ \eta \sum_{s > 6} \frac{F_s}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^s} - \frac{F_6}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^6}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > r_1, \end{cases} \quad (\text{V.3}) \end{aligned}$$

где  $r_1$  — условная точка, в которой  $K(r_1) \sim 0$ .

## § 2. Первое приближение для акустического поля при наличии источника акустических волн

Звуковые волны в кристалле модулированы периодической структурой кристалла (глава IV, § 4):

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, p) = & e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{n_1 n_2 n_3} b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, p) e^{i n \mathbf{a} \mathbf{r}}, \\ n \mathbf{a} = & \left( \frac{2\pi}{d_1} n_1, \frac{2\pi}{d_2} n_2, \frac{2\pi}{d_3} n_3 \right). \end{aligned}$$

Амплитуды  $b_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{v}, p)$  определяются при учете следующих приближений:

1) малости внешнего возмущения и соответственно малости вызываемых им амплитуд акустического поля;

2) малости молекулярных сил, образующих потенциальную яму, в сравнении с силами отталкивания (малость параметра  $\eta$  в формуле (V.3) для  $K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ );

3) малости отношения  $\langle x_\alpha^2 \rangle / d_\alpha^2 \ll 1$ , что дает возможность даже для относительно больших значений  $l_\alpha$  в амплитудах  $a_{l_1 l_2 l_3}$ , положить

$$a_{l_1 l_2 l_3} \approx \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \equiv \frac{1}{d^3}.$$

Указанные ограничения приводят к результату

$$\tilde{b}_{n,00}(v, p) = \frac{1}{md^3} \frac{1}{\varepsilon(\tilde{k}_1, p)} \sum_{s_1} U_{s_1,00}(p) \frac{i(s_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{p + i(n_1 a_1 - \tilde{k}_1)v},$$

где

$$\tilde{b}_{n,00}(v, p) = \iiint_{(\infty)} b_{n,00}(\mathbf{v}, p) dv_y dv_z,$$

$$\tilde{f}_M(v^2) = \iiint_{(\infty)} f_M(v^2) dv_y dv_z,$$

$$\varepsilon = 1 - \frac{1}{md^3} \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sigma(|m_1 a_1 - \tilde{k}_1|) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(m_1 a_1 - \tilde{k}_1) \partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{p + i(m_1 a_1 - \tilde{k}_1)v} dv. \quad (\text{V.4})$$

Заметим, что функция  $\varepsilon(\tilde{k}_1, p)$  играет роль коэффициента диэлектрической проницаемости для акустического поля. Дисперсионное уравнение акустических волн определяется уравнением  $\varepsilon(\tilde{k}_1, p) = 0$ . Форм-фактор  $\sigma(|m_1 a_1 - \tilde{k}_1|)$  включает в себя только силы отталкивания (на основании ограничения 2).

Важную роль в акустическом поле играет немодулированная компонента  $\tilde{b}_{000}(v, p)$ .

**Т е о р е м а 1.** Акустическое поле в кристалле содержит компоненту  $\tilde{b}_{000}$ , которая переходит в известном пределе в соответствующую амплитуду для аморфных сред.

2. Из всех амплитуд первого приближения наибольшей является амплитуда  $\tilde{b}_{000}$  для всех длин волн, больших периода решетки.

Номера высших гармоник входят в знаменатель правой части выражения для  $\tilde{b}_{n,00}$ , что и определяет вторую часть теоремы.

В случае, когда амплитуды внешнего потенциала, содержащие модулированные компоненты, малы:

$$U_{s,00}^H(s_1 a_1 - \tilde{k}_1) \ll U_{s,00}^H(-\tilde{k}_1),$$

$\delta_{000}$  отличается от амплитуды волн в пространственно-однородных средах только значением коэффициента пропорциональности.

Для этого случая получим

$$\varphi^{(1)}(\tilde{k}, v, p) = \frac{1}{md^3} \frac{U^{\text{н}}(\tilde{k}, p)}{\varepsilon(\tilde{k}, p)} \frac{i\tilde{k}\partial_v \tilde{f}_{\text{М}}(v^2)}{p + i\tilde{k}v}, \quad (\text{V.5})$$

$$U^{(1)}(\tilde{k}, p) = \frac{U^{\text{н}}(\tilde{k}, p)}{\varepsilon(\tilde{k}, p)}.$$

Специфичность кристаллического состояния входит в уравнение для функции распределения только через  $\varepsilon(k, p)$ .

Формула для диэлектрической проницаемости акустических волн упрощается при дополнительных условиях, т. е. при наличии

- 1) длин волн, больших периода решетки,

$$\tilde{k} \ll n_1 a_1 |_{n_1 \gg 1},$$

- 2) короткодействующих форм-факторов:

$$\sigma(|n_1 a_1 - \tilde{k}|) \ll \sigma(|\tilde{k}|).$$

Тогда имеем

$$\varepsilon(\tilde{k}, p) = 1 - \frac{\sigma(\tilde{k})}{md^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-i\tilde{k}) \partial_v \tilde{f}_{\text{М}}(v^2)}{p - i\tilde{k}v} dv. \quad (\text{V.6})$$

Как показано в главе IV, полюса подынтегральной функции лежат в левой полуплоскости  $p$  и имеют вид  $p^{\pm} = i\omega - \gamma$ , где  $\omega$  — частота и  $\gamma$  — затухание волн. При указанных условиях специфичность кристаллического состояния выпала из конечных формул.

Значение теоремы заключается в положительном решении первой из задач, поставленных в § 1.

Для выявления дальнейших свойств акустического поля конкретизируем источник возбуждения в виде двух возмущений в моменты  $t = 0$  и  $t = \tau$ :

$$U^{\text{н}}(x, t) = \Phi_1 \cos k_1 x \delta(\omega_1, t) + \Phi_2 \sin k_2 x \delta(\omega_2(t - \tau)), \quad (\text{V.7})$$

где амплитуды  $\Phi_1, \Phi_2$ , а также волновые числа  $k_1$  и  $k_2$  задаются внешними условиями.

Суперпозиция подобных возмущений может отобразить реальные способы возбуждения акустических колебаний. В переменных  $x, v, p$  отклик от первого импульса будет

$$\varphi_{\pm k_1}^{(1)}(x, v, p) = \pm \frac{\Phi_1}{2md^3 \omega_1 \varepsilon(k_1, p)} \frac{i k_1 \partial_v \tilde{f}_{\text{М}}(v^2)}{p \pm i k_1 v} e^{\pm i k_1 x}, \quad (\text{V.8})$$

$$U_{\pm k_1}^{(1)}(x, p) = \pm \frac{\Phi_1}{2\omega_1 \varepsilon(k_1, p)} e^{\pm i k_1 x},$$

и соответственно для второго импульса

$$\begin{aligned}\varphi_{\pm k_2}^{(1)}(x, v, p) &= \frac{\Phi_2}{2md^3\omega_2} \frac{ik_2\partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{p \pm ik_2v} \frac{e^{-p\tau} \cdot e^{\pm ik_2x}}{\varepsilon(\pm k_2, p)}, \\ U_{\pm k_2}^{(1)}(x, p) &= \mp \frac{\Phi_2}{2\omega_2} \frac{e^{-p\tau} \cdot e^{\pm ik_2x}}{\varepsilon(\pm k_2, p)}.\end{aligned}\quad (\text{V.9})$$

Переходя к представлению  $x, v, t$ , необходимо учитывать наличие нулей функции  $\varepsilon(k, p)$ , расположенных в левой части полуплоскости  $p$ .

При образовании средних

$$\rho^{(1)}(x, t), j^{(1)}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} (1, v) \varphi^{(1)}(x, v, t) dv$$

подынтегральную функцию  $(p \pm ikv)^{-1}$  разлагаем в ряд по отношению  $v/v_\Phi$ , так как фазовые скорости волн в кристаллах превышают среднюю тепловую скорость частиц. Далее, пренебрегая аддитивно входящими малыми членами, пропорциональными  $\gamma$ , получим

$$\begin{aligned}U^{(1)}(x, t) &= \Phi_1 e^{-\gamma_1 t} \sin \omega_1 t \cos k_1 x + \Phi_2 e^{-\gamma_2 t} \sin \omega_2 (t - \tau) \sin k_2 x, \\ \rho^{(1)}(x, t) &= \frac{1}{d^3} \left( \frac{\Phi_1 \alpha_1}{mv_{\Phi_1}^2} e^{-\gamma_1 t} \sin \omega_1 t \cos k_1 x + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Phi_2 \alpha_2}{mv_{\Phi_2}^2} e^{-\gamma_2 t} \sin \omega_2 (t - \tau) \sin k_2 x \right), \\ j^{(1)}(x, t) &= \frac{1}{d^3} \left( \frac{\Phi_1 \alpha_1}{mv_{\Phi_1}^2} e^{-\gamma_1 t} \cos \omega_1 t \cdot \sin k_1 x + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Phi_2 \alpha_2}{mv_{\Phi_2}^2} e^{-\gamma_2 t} \cos \omega_2 (t - \tau) \cos k_2 x \right),\end{aligned}\quad (\text{V.10})$$

где

$$\begin{aligned}\alpha_i &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} 2(2m+1)! \left( \frac{k_i v_\tau}{\omega_i} \right)^{2m}, \quad i = 1, 2, \\ v_{\Phi_i}^2 &\equiv \left( \frac{\omega}{k} \right)_i^2 = \frac{\sigma(|k_i|)}{md^3} + \frac{3\theta}{m} + \dots, \quad i = 1, 2, \\ \gamma_i &= -k_i \frac{\pi}{2} v_{\Phi_i}^3 \partial_{v_{\Phi_i}} \tilde{f}_M \left[ \left( \frac{v_{\Phi_i}}{v_\tau} \right)^2 \right].\end{aligned}$$

Акустическое поле является затухающим уже в первом приближении по амплитудам, в отличие от классической теории. Коэффициент затухания для  $v_{\Phi_i}/v_\tau > 1$  экспоненциально мал. Функции  $U^{(1)}(x, t)$ ,  $\rho^{(1)}(x, t)$ ,  $j^{(1)}(x, t)$  при определенном значении параметров содержат бегущие волны, например, при  $k_1 = k_2$   $\Phi_1 e^{-\gamma_1 t} = \Phi_2$ ,  $\gamma_1 = \gamma_2$ ,  $\omega_1 = \omega_2$ .

### § 3. Особенности нелинейного механизма в акустическом поле. Второе приближение для акустического поля

В исходном статистическом уравнении, описывающем поведение акустического поля в кристалле, появляется нелинейный член

$$\frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) U(\mathbf{k}-\mathbf{q}, p-p') \nabla_{\mathbf{v}} \Phi(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p+ikv} \equiv F(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p), \quad (\text{V.11})$$

где

$$U(\mathbf{k}, p) = \sigma(|\mathbf{k}|) \delta\rho(\mathbf{k}, p) + U^{\text{н}}(\mathbf{k}, p), \\ \delta\rho(\mathbf{k}, p) = \int_{(\infty)} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) d\mathbf{v}.$$

**Т е о р е м а.** Существует универсальный механизм нелинейности, не зависящий от ограничений, связанных со структурой сред. Этот нелинейный механизм включает молекулярное взаимодействие между элементами изменения плотности статистического континуума в пространстве координат, вызванное акустическим полем, а также изменения в распределении скоростей частиц за счет фактора

$$\nabla_{\mathbf{v}} \Phi(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p').$$

В нелинейный член не входят структурные параметры сред и, в частности, кристалла.

Значение теоремы заключается в констатации существования причины общности нелинейных эффектов в кристаллах, жидкостях и газах.

Нелинейный член в исходном уравнении для функции распределения  $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$  входит в третий член этого уравнения. Обратимся к первому члену уравнения (V.11):

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) \supset \frac{1}{m} \sum_l a_l U(\mathbf{k}-l\mathbf{a}, p) \frac{i(\mathbf{k}-l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p+ikv}.$$

Учитывая малость параметра  $\eta$ , входящего в фактор  $\sigma_{f_0}(|l\mathbf{a}|)$ , и интегрируя исходное уравнение для  $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$  по скоростям, имеем

$$\delta\rho(\mathbf{k}, p) = \frac{1}{m} \sum_l a_l \left[ U^{\text{н}}(\mathbf{k}-l\mathbf{a}, p) + \sigma(|\mathbf{k}-l\mathbf{a}|) \delta\rho(\mathbf{k}-l\mathbf{a}, p) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(\mathbf{k}-l\mathbf{a}) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p+ikv} d\mathbf{v} \right] = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} F(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) d\mathbf{v}. \quad (\text{V.12})$$

Общий вид зависимости  $\delta\rho$  от  $F$  позволяет сформулировать теорему.

**Т е о р е м а.** Существует опосредствованный способ влияния нелинейного механизма на акустическое поле, зависящий от структуры сред.

Действительно, нелинейный механизм  $F(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$  возбуждает изменение плотности в среде  $\delta\rho(\mathbf{k}, p)$ , которое через посредство молекулярного потенциала воздействует на акустическое поле, описываемое функцией распределения  $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$ . Путь влияния нелинейности характеризуется явной зависимостью от параметров кристалла. В этом случае зависимость от скоростей частиц предопределена температурным распределением в невозмущенном кристалле.

Теорема указывает на наличие в кристаллах специфических нелинейных эффектов, которые отсутствуют в аморфной среде.

Уравнение второго приближения по амплитудам волн имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) = & \frac{1}{m} \sum_t a_t \sigma(|\mathbf{k} - \mathbf{l}_a|) \int_{(\infty)} \varphi^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{l}_a, \mathbf{v}, p) d\mathbf{v} \times \\ & \times \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{l}_a) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \frac{1}{m} \sum_t a_t \sigma_{f_0}(|\mathbf{l}_a|) \frac{i\mathbf{l}_a \nabla_{\mathbf{v}} \varphi^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{l}_a, \mathbf{v}, p)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \\ & + \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (\text{V.13})$$

Оно не содержит источника возбуждения волн и всецело определяется нелинейным механизмом, выраженным через первое приближение. Дальнейшее использование разложения по параметру  $\eta$  исключает член, пропорциональный  $\sigma_{f_0}$ , что позволяет все члены справа выразить через  $F(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$ . Это и определяет решение уравнения второго приближения:

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) = & \\ = & \frac{1}{m} \sum_t a_t \sigma(|\mathbf{k} - \mathbf{l}_a|) \delta\rho^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{l}_a, p) \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{l}_a) \nabla_{\mathbf{v}} f_M(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \\ & + \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (\text{V.14})$$

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(2)}(\mathbf{k}, p) &= \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}} \sigma(|\mathbf{k} - \mathbf{l}a|) \delta\rho^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{l}a, p) \int_{(\infty)} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{l}a) \nabla_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{M}}(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} d\mathbf{v} = \\ &= \int_{(\infty)} d\mathbf{v} \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i(\mathbf{k}\mathbf{v})}. \end{aligned}$$

Ограничиваясь здесь случаем длин волн, больших периода решетки, наличием короткодействующих форм-факторов, а также достаточно низких температур (см. § 2), получаем

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p) &= \frac{1}{md^3} \frac{i\mathbf{k} \nabla_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{M}}(v^2)}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} \frac{\sigma(|\mathbf{k}|)}{\varepsilon(\mathbf{k}, p)} \frac{1}{m} \int_{(\infty)} d\mathbf{v} \times \\ &\times \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} + \\ &+ \frac{1}{m} \int_{(\infty)} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, p - p') \nabla_{\mathbf{v}} \varphi^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{v}, p')}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (\text{V.15})$$

где  $\varepsilon(\mathbf{k}, p)$  определяется из первого приближения. В формуле для  $\varphi^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, p)$  прямой и опосредствованный способ влияния нелинейного механизма на амплитуду акустического поля представлен явно.

Второй способ влияния исчезает в пределе длинных волн  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ , поскольку при этом  $\varepsilon(\mathbf{k}, p)|_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} \neq 0$ . Формула для  $\varphi^{(2)}$  не содержит параметров кристалла — этим доказывается существование аморфного приближения в кристалле и во втором приближении. Переходя к представлению  $x, v, t$ , получим следующую суперпозицию акустических возбуждений:

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)}(x, v, t) &= \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{e^{pt}}{p + i\mathbf{k}\mathbf{v}} \frac{1}{m} \times \\ &\times \left[ \frac{\sigma(|\mathbf{k}|) i\mathbf{k} \partial_{\mathbf{v}} \tilde{f}_{\mathbf{M}}(v^2)}{md^3 \varepsilon(\mathbf{k}, p)} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(x, p - p') \partial_{\mathbf{v}} \varphi_q^{(1)}(x, v, p') + \right. \\ &\left. + \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) U^{(1)}(x, p - p') \partial_{\mathbf{v}} \varphi_q^{(1)}(x, v, p') \right], \end{aligned} \quad (\text{V.16})$$

где по волновым числам  $k, k - q, q$ , пробегающим значения

$$k = 0, \pm 2k_1, \pm 2k_2, \pm(k_1 + k_2), \pm(k_2 - k_1);$$

$$k - q = \pm k_1, \pm k_2; \quad q = \pm k_1, \pm k_2,$$

производится суммирование. Таким образом, акустическое поле, вызванное источником, характеризуется дискретным набором комбинационных волновых чисел и непрерывным набором частот (интеграция по  $p$ ) при наличии затухания.

#### § 4. Существование акустического ветра в кристаллах и его свойства

Слагаемые в решении (V.16) для  $\varphi^{(2)}(x, v, t)$ , соответствующие волновым числам  $\pm 2k_1, \pm 2k_2, \pm(k_1 + k_2)$ , приводят к пространственно-осцилляторным членам в акустическом поле, которые при усреднении дают нуль. Слагаемые с  $k = 0$  и  $k_2 - k_1$  при  $k_2 \rightarrow k_1$  характеризуются пространственной однородностью и должны включать в себя эффект акустического ветра при условии, если

$$\int_{-\infty}^{\infty} v \varphi_k^{(2)} dv \neq 0.$$

Возможные изменения фона (плотности числа частиц) и плотности тока для компоненты с  $k = 0$  определяются формулами:

$$\begin{pmatrix} \rho_k^{(2)} \\ j_k^{(2)} \end{pmatrix} = C \int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} 1 \\ v \end{pmatrix} dv \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{e^{pt}}{p} \times$$

$$\times \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \frac{1}{\varepsilon(\pm k_s, p - p') \varepsilon(\pm k_s, p')} \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{p \pm ik_s v},$$

$$k_s = k_1, k_2. \quad (\text{V.17})$$

Нетрудно убедиться, что за счет интегрирования по скорости интегралы обращаются в нуль в обоих случаях. Таким образом, если и существует пространственно-однородная компонента акустического ветра, она должна принадлежать членам с  $k_2 - k_1 \rightarrow 0$ :

$$\varphi_{k_2 - k_1}^{(2)}(x, v, t) = (\mp C) e^{\pm i(k_2 - k_1)x} \times$$

$$\times \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{e^{pt}}{p \pm i(k_2 - k_1)v} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \left[ \frac{e^{-(p-p')\tau}}{\varepsilon(k_1, p - p') \varepsilon(k_1, p')} \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M}{p' \pm ik_1 v} + \right.$$

$$\left. + \frac{e^{-ip'\tau}}{\varepsilon(k_2, p - p') \varepsilon(k_2, p')} \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M}{p' \pm ik_2 v} \right] \quad (\text{V.18})$$

$$\left( C = i \frac{\Phi_1 \Phi_2}{4m^2 d^3} \frac{k_1 k_2}{\omega_1 \omega_2} \right).$$

При этом мы учли, что первый член в выражении (V.18) для  $\Phi^{(2)}(x, v, t)$  обращается в нуль при  $k_2 - k_1 = 0$ . При вычислении  $\Phi_{k_2-k_1}^{(2)}$  поставим задачу выделить и удержать только те члены, которые при  $k_2 \rightarrow k_1$  не исчезают при усреднении по времени, либо при  $t \rightarrow \infty$ .

Таковыми членами являются следующие:

$$\begin{aligned} & (\mp C) e^{\pm i(k_2-k_1)x \mp i(k_2-k_1)v(t-\tau)} \times \\ & \times \left\{ \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M \cdot e^{\pm ik_1 v \tau}}{\varepsilon(k_1, \pm ik_1 v) \varepsilon(k_2, \mp ik_2 v)} + \frac{e^{p_1 \pm \tau}}{e'(k_1, p_1^\pm) \varepsilon(k_2, \mp v(k_2 - k_1) - p_1^\pm)} \right\} \times \\ & \times \left[ \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{p_1^\pm \mp ik_1 v} + \frac{\partial_v^2 \tilde{f}_M(v^2)}{-p_1^\pm \pm ik_1 v} + \frac{\mp k_2 \partial_v \tilde{f}_M(v^2)}{(-p_1^\pm \pm ik_1 v)^2} \right]. \quad (\text{V.19}) \end{aligned}$$

Отсюда получаем при  $k_2 - k_1 = 0$

$$\Phi_{k_2-k_1=0}^{(2)} = \mp C \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial_v \tilde{f}_M(v^2) e^{\pm ik_1 v \tau}}{\varepsilon(k_1, \pm ik_1 v) \varepsilon(k_1, \mp ik_1 v)}. \quad (\text{V.20})$$

Этим доказывается существование пространственно-однородной и стационарной анизотропии в распределении скоростей частиц среды, вызванное акустическим полем во втором приближении.

Так как

$$\rho_{k_2-k_1=0}^{(2)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{k_2-k_1=0}^{(2)} dv = 0,$$

то из полученной формулы непосредственно следует отсутствие изменений в средней плотности среды.]

Для плотности потока частиц имеем

$$j_{k_2-k_1=0}^{(2)} = -2C \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \tilde{f}_M(v^2) e^{-ik_1 v \tau} dv}{\varepsilon(+k_1, -ik_1 v) \varepsilon(-k_1, +ik_1 v)}. \quad (\text{V.21})$$

Замыкая контур интегрирования в нижней полуплоскости, учитывая, что неограниченный рост числителя на комплексной полуокружности компенсируется ростом дисперсионной проницаемости на основе теоремы Привалова — Племяля, и определяя вычеты в нулях  $\varepsilon(+k_1, -ik_1 v)$ , для интеграла (V.21) имеем

$$\frac{(-2\pi i) \partial_v \tilde{f}_M [(V_I^\pm)^2] e^{-ik_1 V_I^\pm \tau}}{e'(V_I^\pm) \varepsilon(-V_I^\pm)}, \quad V_I^\pm = \frac{\pm i\omega_1 - \gamma_1}{k}.$$

Раскрывая диэлектрические проницаемости в приближении длинных волн, получаем следующее значение для акустического

ветра в кристаллах:

$$j_{k_x-k_1=0}^{(2)} = \frac{\Phi_1 \Phi_2}{2m^2 d^3 v_\Phi^3} \sin \omega_1 \tau \cdot e^{-\gamma_1 \tau}. \quad (\text{V.22})$$

Для максимальной амплитуды ветра, используя выражение плотности частиц в первом приближении, имеем

$$\max j_{k_x-k_1=0}^{(2)} = \rho_0 v_\Phi \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\max \rho^{(1)}}{\rho_0} \right)^2, \quad \rho_0 = \frac{1}{d^3}. \quad (\text{V.23})$$

Аналогичное вычисление для постоянной составляющей плотности кинетической энергии волн дает

$$\left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{mv^2}{2} \varphi^{(2)} dv \right\rangle_{k_x-k_1=0} = \frac{\Phi_1 \Phi_2}{4md^2 v_\Phi^2} \sin \omega_1 \tau e^{-\gamma_1 \tau}, \quad (\text{V.24})$$

или, выражая полученное значение через амплитуду первого приближения:

$$\max \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{mv^2}{2} \varphi^{(2)} dv \right\rangle_{k_x-k_1=0} = \frac{mv_\Phi^2}{2} \rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\max \rho^{(1)}}{\rho_0} \right)^2. \quad (\text{V.25})$$

Таким образом, существует пространственно-однородный акустический ветер, являющийся следствием анизотропии в распределении скоростей, которая вносится акустическим полем в исходную максвелловскую функцию распределения скоростей атомов в кристалле.

Величина акустического ветра в кристаллах отличается от случая газов и жидкостей значением средней плотности среды и величинами, входящими в выражение фазовой скорости акустических возмущений (см. рис. 8 и 9).

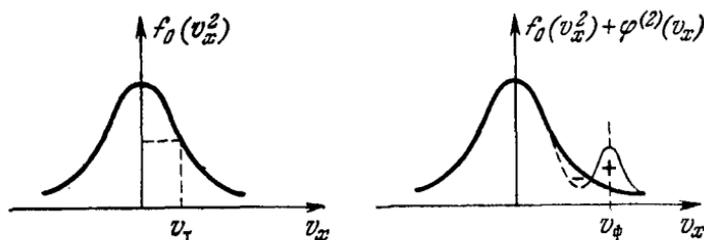


Рис. 8.

Формулы, выражающие стационарные плотности переноса массы и плотность кинетической энергии в звуковой волне, имеют малый параметр  $\frac{1}{2} \left( \frac{\max \rho^{(1)}}{\rho} \right)^2$ . Этот параметр нельзя отнести к фазовой скорости волн, так как величина  $v_\Phi$  фигурирует в выражении

ях и для потока числа частиц, и для плотности энергии. Малый параметр можно отнести только к средней плотности среды  $\rho_0$ . Таким образом, на частицу, участвующую в стационарном переносе, приходится следующие величины импульса и энергии:  $mv_\phi$ ,  $1/2mv_\phi^2$ . В плотных средах эти величины значительно превышают среднетепловые значения тех же величин ( $v_\phi > v_T = (\theta/2m)^{1/2}$ ). Число подобных частиц в единице объема, участвующих в переносе, однако весьма мало и составляет величину

$$1/2\rho_0 (\delta\rho/\rho)^2.$$

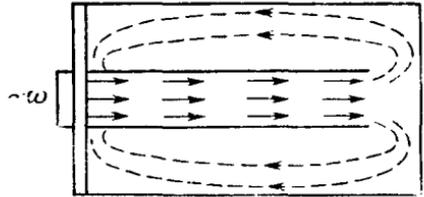


Рис. 9.

Резюмируя изложенное, можно утверждать, что существует акустический ветер в реальных кристаллах, в акустическом поле имеют место аномально большие скорости частиц.

Оба следствия теории могут подвергнуться экспериментальной проверке.

### § 5. Акустический ветер в пространственно-однородной среде, без наличия источников

В пространственно-однородной среде существует точное решение исходного статистического уравнения, удовлетворяющее условиям стационарности и независимости от пространственных переменных. Будем искать решение, мало отличающееся от однородного:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f_0(v^2) + \varphi_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad |\varphi| \ll f_0.$$

Для плоской волны, распространяющейся вдоль оси  $x$ , вводя функцию распределения, зависящую от трех переменных,  $x, v, t$ ,

$$\varphi_1(x, v, t) = \iint_{(\infty)} \varphi_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) dv_y dv_z,$$

имеем в качестве исходного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_1(x, v, t)}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_1(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \frac{\partial f_0}{\partial v} - \\ - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_1(x', v, t) d\mathbf{r}' dv \frac{\partial \varphi_1}{\partial v}, \quad (\text{V.26}) \end{aligned}$$

$$v \equiv v_x, \quad f_0(v) = \iint_{(\infty)} f_0(\mathbf{v}) dv_y dv_z.$$

В линеаризованном приближении получим

$$\begin{aligned} \varphi_1(x, v, t) &= g(v) \cos(\omega t - kx), \\ g(v) &= \frac{k}{m} \frac{\sigma(k) \partial_v f_0}{(kv - \omega)} \delta \rho, \end{aligned} \quad (\text{V.27})$$

$$\sigma(k) = \int K(|r - r'|) \cos k(x - x') dr', \quad \delta \rho = \int_{(-\infty)}^{\infty} g(v) dv.$$

Дисперсионное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} 1 - \frac{\sigma(k)}{m} \rho_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - \omega/k} dv &= 0, \\ f_0 &= \rho_0 f_M(v), \quad \int_{(-\infty)}^{\infty} f_M dv = 1. \end{aligned} \quad (\text{V.28})$$

Если полагать затухание малым, то, как показано в главе IV, интеграл в дисперсионном уравнении и интегралы для средних величин надо понимать в смысле главного значения:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - \omega/k} dv &= \\ &= \frac{1}{2} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - \omega/k + i\alpha} dv + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - \omega/k - i\alpha} dv \right]. \end{aligned} \quad (\text{V.29})$$

Если функцию распределения по скоростям выбирать максвелловской, то получим

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{v - \omega/k} dv = -\frac{2m}{\theta} \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos vx dx, \quad (\text{V.30})$$

$$v = \frac{v_\Phi}{v_T}, \quad v_\Phi = \frac{\omega}{k}, \quad v_T = \left( \frac{\theta}{2m} \right)^{1/2}.$$

Таким образом, дисперсионное уравнение приобретает вид

$$\frac{\theta}{2\sigma(k) \rho_0} = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos vx dx \equiv I(v), \quad (\text{V.31})$$

где  $I(v)$  табулирована в [7].

В следующих приближениях необходимо учитывать не только высшие члены разложения по амплитуде волн, но и по частоте. Если  $\Omega$  обозначает точное значение частоты, то  $\Omega = \omega + \omega_1 +$

+  $\omega_2$  + ..., где  $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$  — члены более высокого порядка малости по сравнению с  $\omega$ .

Используя первое приближение, для второго получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi^2}{\partial t} + v \frac{\partial \Phi^2}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Phi_2(x', v, t) d\mathbf{r}' dv = \\ = \frac{k}{m} \frac{dg}{dv} \sigma(k) \cdot \delta \rho \sin 2(\Omega t - kx) - \omega_1 g(v) \sin(\Omega t - kx). \end{aligned} \quad (\text{V.32})$$

Решение этого уравнения ищем в виде [17]

$$\begin{aligned} \Phi_2(x, v, t) = \Phi_{20}(v) + \Phi_{21}(v) \cos(\Omega t - kx) + \\ + \Phi_{22}(v) \cos 2(\Omega t - kx) + \dots \end{aligned} \quad (\text{V.33})$$

Как увидим ниже, во втором приближении  $\Phi_{20} \neq 0$ , и поэтому существует стационарная добавка к равновесной функции распределения.

Для того чтобы определить функцию  $\Phi_{20}$ , поступим следующим образом [17]: предположим, что амплитуда волны является медленно меняющейся функцией времени. Тогда  $\Phi_{20}$  должна зависеть от времени таким же образом. Зависимость амплитуды волны от времени должна быть такой, чтобы удовлетворялось линеаризованное уравнение. Такую зависимость можно получить, если предположить, что частота  $\omega$  имеет малую мнимую добавку  $i\gamma$ . Решение линеаризованного уравнения можно записать при этом в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(x, v, t) = \frac{1}{2} g(v) e^{i\gamma t - ikx} + \frac{1}{2} g^{\pm}(v) e^{-i\gamma t + ikx}, \\ p = \omega + i\gamma, \quad g(v) = \frac{k}{m} \sigma(k) \rho_0 \frac{\partial_v J_M}{kv - p}. \end{aligned} \quad (\text{V.34})$$

Используя подобное представление нулевого приближения, для уравнения второго приближения получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} + v \frac{\partial \Phi_2}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Phi_2(x', v, t) d\mathbf{r}' dv = \\ = \frac{ik}{4m} \sigma(k) \left[ \frac{\partial g}{\partial v} \int g^+(v) dv - \frac{\partial g^+}{\partial v} \int g(v) dv \right] e^{-2\gamma t} + Q(x, v, t), \end{aligned} \quad (\text{V.35})$$

где  $Q(x, v, t)$  — осциллирующие члены. Решение этого уравнения будем искать в виде

$$\Phi_2(x, v, t) = \Phi_{20}(v) e^{-2\gamma t} + O(e^{p t}). \quad (\text{V.36})$$

Подстановка (V.36) в (V.35) дает следующую формулу для  $\Phi_{20}(v)$ :

$$\Phi_{20}(v) = -\frac{ik}{8m} \sigma(k) \frac{1}{\gamma} \left[ \frac{dg}{dv} \int g^+(v) dv - \frac{dg^+}{dv} \int g(v) dv \right].$$

Используя выражение (V.34) для  $g(v)$ , а затем устремляя  $\gamma$  к нулю, получаем [17]

$$\varphi_{20}(v) = \frac{1}{4m^2} \sigma^2(k) \rho_0^3 \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 \frac{d}{dv} \frac{\partial_v f_M}{(v - \omega/k)^2}. \quad (\text{V.37})$$

Таким образом, существует и пространственно-однородная стационарная добавка к равновесной функции распределения, вызванная волновым процессом. Эта добавка вносит анизотропию в распределение скоростей, обусловленную наличием звуковой волны. Вычислим плотность потока частиц и плотность кинетической энергии, вызываемых этой добавкой:

$$j = \int_{-\infty}^{\infty} v \varphi_{20} dv = - \frac{1}{4m^2} \sigma^2(k) \rho_0^3 \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{(v - \omega/k)^2} dv, \quad (\text{V.38})$$

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{mv^2}{2} \varphi_{20} dv = - \frac{1}{4m} \sigma^2(k) \rho_0^3 \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v \partial_v f_M}{(v - \omega/k)^2} dv.$$

Учитывая, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v f_M}{(v - \omega/k)^2} dv = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - \omega/k} dv$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 f_M}{v - \omega/k} dv = \left( \frac{2m}{\theta} \right)^3 \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx, \quad v = \frac{\omega}{k (\theta/2m)^{1/2}},$$

получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} v \varphi_{20} dv = - \frac{1}{4m^2} \sigma^2(k) \rho_0^3 \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 \left( \frac{2m}{\theta} \right)^3 \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{mv^2}{2} \varphi_{20} dv =$$

$$= - \frac{\sigma^2(k) \rho_0^3}{4} \left( \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 \left[ 1 + \frac{\sigma(k)}{m} \rho_0 \frac{\omega}{k} \left( \frac{2m}{\theta} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx \right]. \quad (\text{V.39})$$

В приближении

$$v_{\Phi}^2 \gg v_T^2 = \theta/2m \quad (v \gg 1),$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx \rightarrow -2/v^3$$

акустический ветер и плотность кинетической энергии в потоке ветра приобретают вид

$$\delta j = v_{\Phi} \rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\delta \rho}{\rho_0} \right)^2, \quad \delta \varepsilon = \frac{m v_{\Phi}^2}{2} \rho_0 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\delta \rho}{\rho_0} \right)^2; \quad (\text{V.40})$$

при этом необходимо учитывать, что средняя плотность среды при наличии волн остается неизменной, так как

$$\delta \rho = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{20} dv = 0.$$

Приходим к следующим выводам:

1. Сравнивая выражения для акустического ветра в кристаллах (§ 4) и жидкостях, находим, что они вполне аналогичны. Это указывает дополнительно на общность механизма возникновения акустического ветра. Разница проявляется только в численных значениях параметров средней плотности сред, скорости звука и величине амплитуд звука в обоих случаях.

2. Если фазовая скорость акустических волн в среде превышает среднюю тепловую скорость частиц, то в акустическом ветре преобладают скорости частиц, равные фазовой скорости волн, но с малым значением их концентрации.

3. Проведенное рассмотрение применимо и к электронной плазме. Специализация относится только к значению фазовой скорости электроакустических волн. Для плазмы

$$v_{\Phi}^2 \approx \frac{\omega_0^2}{k^2} \Big|_{k \rightarrow 0} \gg v_T^2, \quad \omega_0^2 = \frac{4\pi\rho_0 e^2}{m},$$

поэтому появление аномально больших скоростей особенно сильно выражено. Теория указывает значение концентрации «вторичных» электронов:  $\frac{1}{2} \rho_0 (\delta \rho / \rho_0)^2$ , определяемое амплитудой электроакустического поля.

# ЕДИНАЯ ТЕОРИЯ ЯВЛЕНИЙ КАНАЛИРОВАНИЯ, ЭФФЕКТА ТЕНЕЙ И ПЯТЕН ВЕНЕРА, ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ МОНОКРИСТАЛЛЫ

---

## § 1. Постановка проблемы и метод решения

Четко выраженные эффекты каналирования и теневые эффекты [30, 31], воспроизводящие структуру кристаллов в рассеянии тяжелых заряженных частиц, наблюдаемые экспериментально, могут явиться мощным средством для проверки правильности теоретических воззрений на молекулярный механизм кристаллического состояния. Теоретические работы в этой области основываются на классической модели кристалла и локальном способе описания движения частиц через кристаллическую решетку.

Однако подобный подход приводит к трудностям. Во-первых, не дается аналитического описания распределения интенсивности рассеянных частиц (производится только оценка порядка характерных углов каналирования). Во-вторых, не охватываются две стороны явления — собственно каналирование и теневые эффекты. И, в-третьих, приходится вводить гипотезу о возможности усреднения потенциала действующего на частицы пучка со стороны атомов цепочки, вдоль которой пролетает частица, что приводит к сильным ограничениям. К тому же требуется, чтобы радиус действия экранированного потенциала был велик по сравнению с радиусом теплового разброса атомов в кристалле. В теории налицо практическая независимость углов каналирования от упругих коэффициентов кристалла.

Введение непрерывного потенциала не только для атомных цепочек, но и для кристаллографических плоскостей до сих пор не поддается строгому теоретическому оправданию. Модель кристалла со свободно перемещающимися атомами (см. главу II) характеризуется непрерывностью местоположения атомов в кристалле, вызванной не процессом усреднения, а первичностью понятий статистической нелокальности температурного происхождения. Особо отчетливо эта непрерывность проявляется в метастабильных возбужденных состояниях кристалла в виде решеточно-нитевидных и решеточно-пластинчатых структур; направления нитей и плоскостей совпадают с направлениями кристаллографических осей и плоскостей, отличающихся максимальной заселенностью атомов. В нитях и плоскостях атомы расположены с одинаковой вероятностью. Возникает предположение, что экспериментально наблюдаемая непрерывность распределения интенсивности рассеянных частиц в пятнах и особенно вдоль линий протонограмм

обусловлена сплошностью нитевидных и пластинчатых структур. При этом указанные возбуждения должны возникать под влиянием пучка быстрых частиц.

Энергия одной быстрой частицы достаточна для возникновения блока из исследуемых структур таких размеров, чтобы играть роль в рассеянии. Полагая высоту блока порядка толщины металлических фольг в эксперименте ( $\sim 10^{-4}$  см), а ребро основания  $\sim 10^2$  атомных слоев и энергию перехода кристаллической фазы в нитевидную, рассчитанную на один атом, порядка 0,1 эв, получаем энергию возбуждения блока  $\sim 1$  Мэв, совпадающую по порядку величины с энергией частицы в опытах по каналированию.

В рассматриваемой модели кристалла не требуется условий корреляции отдельных пролетов ввиду исходной непрерывности местоположения атомов в направлении нитевидных и пластинчатых структур; поэтому явления каналирования и блокировок должны существовать и для быстрых нейтронов, отличаясь от подобных явлений для заряженных частиц только численным значением параметров, которые теория должна определить.

Существуют следующие основания для постановки вопроса об общности механизма явлений распыления атомов монокристаллов, приводящего к пятнам Венера [32, 33], с одной стороны, и эффекта блокировки («теней») — с другой. В обоих случаях существует находящийся внутри кристаллов центр излучения (или рассеяния) частиц. В обоих случаях основную роль играют отталкивательные силы взаимодействия между движущимися частицами и атомами кристалла.

Естественно возникает вопрос: не являются ли качественные различия между пятнами Венера и лунками блокировок следствием лишь количественного различия в параметре взаимодействий, характеризующем силы отталкивания между атомами кристалла и движущимися частицами при сохранении в обоих случаях механизма трансляции частиц через кристалл?

Исходная система уравнений опирается на статистическое описание движущихся через монокристалл частиц (в дальнейшем будем называть эти частицы частицами пучка), нелокальную теорию кристалла, взаимодействие каждой частицы пучка со всеми атомами кристалла одновременно, взаимодействие частиц пучка между собой [13]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}} \mathbf{v} f + \operatorname{div}_{\mathbf{v}} \int_{(\infty)} \dot{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\dot{\mathbf{v}} = Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

$$\frac{\int_{(\infty)} \dot{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\dot{\mathbf{v}}}{\int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d\dot{\mathbf{v}}} = - \frac{1}{m} \operatorname{grad}_{\mathbf{r}} [U_f(\mathbf{r}) + Z_1 e \varphi(\mathbf{r}, t)], \quad (\text{VI.1})$$

$$U_f(\mathbf{r}) = \int_{(\infty)} K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \Delta\varphi = -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v},$$

$$\rho(\mathbf{r}) = C e^{-U(\mathbf{r})/\theta}, \quad U(\mathbf{r}) = C \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-U(\mathbf{r}')/\theta} d\mathbf{r}'.$$

Здесь правая часть в первом уравнении учитывает роль источника частиц, каким может являться инжектируемое в кристалл радиоактивное ядро или ядро самого кристалла, на котором произошло рассеяние на достаточно большие углы,  $U_f(\mathbf{r})$  — потенциал поля, действующего на данную частицу пучка со стороны всего кристалла,  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  — потенциал поля, действующего на частицу пучка со стороны всех частиц пучка,  $Z_1 e$  — заряд иона пучка,  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — парный потенциал взаимодействия заряженной частицы пучка с атомом кристалла,  $K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — потенциал парного взаимодействия двух атомов кристалла и  $U(\mathbf{r})$  — потенциал поля, действующего на рассматриваемый атом кристалла со стороны всего кристалла.

Для частиц, имеющих центр излучения внутри монокристаллической фольги,  $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \neq 0$ . В этом случае решение исходной системы внутри фольги будет решением в виде «отклика», вызванного источником  $Q$ , который можно представить в следующем виде:

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \Phi(|\mathbf{v}|) \left( \frac{w_{aa}}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{w_{aa}}{2a} r^2\right). \quad (\text{VI.2})$$

Здесь  $\Phi(|\mathbf{v}|)$  — некоторая изотропная функция распределения скоростей частиц у источника этих частиц. Конкретный вид этой функции несуществен для дальнейшего, так как она будет определять интенсивность почернения на фотопластинке и не будет влиять на ширину пятен и линий на протонограммах;  $(w_{aa}/2\pi\theta)^{3/2}$  — множитель, нормирующий вероятность местоположения центра источника на единицу,  $(\theta/w_{aa})^{1/2}$  — дисперсия координат центра источника,  $\theta$  — температура источника,  $w_{aa}$  — упругий коэффициент, характеризующий потенциальную яму, в которой находится источник.

Для заряженных частиц пучка, а также для нейтронов можно пользоваться конкретизацией функции  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  в виде экранированных потенциалов

$$K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\kappa_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, - \frac{G g^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\kappa_g |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right), \quad (\text{VI.3})$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  — порядковые номера заряженных частиц пучка и атомных ядер кристалла,  $G$  — коэффициент, зависящий от атомного веса ядер в кристалле,

$$\kappa^{-1} = a_B \cdot 0,8853 (Z_1^{3/2} + Z_2^{3/2})^{-1}, \quad \kappa_g^{-1} \approx 10^{-13} \text{ см.}$$



После получения решения его необходимо усреднить по объему источника. В нулевом и первом приближениях находим

$$\begin{aligned} \rho_f(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) &= \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/t}^{\infty} \xi \Phi(\xi) d\xi, \quad \delta\rho_f(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \\ &= \frac{1}{m} \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \int_0^1 \Delta U_f [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta) + \mathbf{r}_0] \eta(1 - \eta) d\eta + \\ &+ \frac{1}{m} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/t}^{\infty} \nabla_{\xi} \Phi(\xi) d\xi \int_0^1 \nabla U_f [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta) + \mathbf{r}_0] \eta d\eta, \\ U_f(\mathbf{r}) &= \int K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (\text{VI.7})$$

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 (2\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x_{\alpha}^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle}\right) \\ &(\Omega = a_x a_y a_z), \end{aligned}$$

где  $\Delta$  — оператор Лапласа, причем дифференцирование производится по всему аргументу функции  $U_f$ ,  $\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}$  — радиус теплового разброса атомов в кристалле,

$$\langle x_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\theta}{\partial_{x_{\alpha}}^2 K|_0} \left[ \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right]^{-1}. \quad (\text{VI.8})$$

Заметим, что формула для  $\rho_f(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$  указывает на существование стационарного распределения концентрации в рассеянном пучке при  $t \rightarrow \infty$ . Второй член в полученной формуле пропорционален не первой, а второй пространственной производной от рассеивающего потенциала  $U_f(\mathbf{r})$ . В случае монотонного убывания  $U_f$  от центра сил,  $\Delta U_f$  — немонотонная функция расстояния и меняет при этом знак. Таким образом, имеется основание ожидать, что формула для  $\rho_f(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$  содержит как эффект каналирования, так и эффект затенения, а также непрерывный переход этих эффектов друг в друга.

Благодаря фактору  $(1 - \eta)$  как множителю у координат в аргументе функции  $U_f$  изменение концентрации в пучке имеет характерную особенность, а именно: поле рассеянных частиц имеет пространственную структуру, геометрически подобную структуре рассеивающей неоднородности. При этом параметр, определяющий изменение пространственных масштабов, непрерывно изменяется от 0 до 1.

## § 2. Пространственная структура в распределении концентрации рассеянных частиц, прошедших через кристалл

Распределение плотности вероятности местоположения центров атомов около узлов кристаллической решетки, если пренебречь анизотропией теплового разброса в узлах, такое:

$$\rho(\mathbf{r}) = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \sum_{h,k,l} \left( \frac{U_{aa}}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{U_{aa}}{2\theta} [(x - ha_x)^2 + (y - ka_y)^2 + (z - la_z)^2] \right\} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \quad (\text{VI.9}) \\ (U_{aa} = \partial_{x_a}^2 \bar{K} |_0).$$

Действующий на частицы пучка потенциал  $U_f(\mathbf{r})$  как функционал плотности  $\rho(\mathbf{r})$  воспроизводит периодическую структуру этой плотности.

Предположим, что кристалл вырезан в виде пластины с координатами границ  $z = \nu_a a_z$ ,  $z = -\nu_b a_z$ , где  $a_z$  — ребро элементарной ячейки вдоль того из кристаллографических направлений, роль которого в рассеянии мы хотим исследовать. Представим  $U_f(\mathbf{r})$  и  $\rho(\mathbf{r})$  в виде ряда Фурье по переменным  $x$  и  $y$  и интеграла Фурье по  $z$ :

$$U_f(\mathbf{r}) = \sum_{n_x, n_y} e^{ik_{\perp} r_{\perp}} \int_{-\infty}^{\nu_a} \left( \sum_{n_z=-\nu_b}^{\nu_a} e^{-ik_z n_z a_z} \right) \rho_{k_{\perp} k_z} \sigma_{fk_{\perp} k_z} e^{ik_z z} dk_z, \\ k_{\perp} \equiv \left( \frac{2\pi}{a_x} n_x, \frac{2\pi}{a_y} n_y \right); \quad n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ \rho_{k_{\perp} k_z} = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{1}{2\pi a_x a_y} \exp \left[ -\frac{\theta}{2U_{aa}} (k_{\perp}^2 + k_z^2) \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} \right], \quad (\text{VI.10}) \\ \sigma_{fk_{\perp} k_z} = \left( \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{(k_{\perp}^2 + k_z^2) + \kappa^2}, -\frac{4\pi G g^2}{k_{\perp}^2 + k_z^2 + \kappa_g^2} \right),$$

где  $\sigma_{fk_{\perp} k_z}$  — фурье-образ функции  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ .

Подставим полученное выражение для функции  $U_f(\mathbf{r})$  в виде ряда (интеграла) Фурье в формулу для  $\delta\rho_f(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$ . Меняя порядок интегрирования по  $k_z$  и  $\eta$ , а затем производя интегрирование по  $\eta$ , получаем

$$\delta\rho_f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, t) = \frac{1}{m} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} \times \\ \times \int_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/t}^{\infty} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} d\xi \sum_{n_x, n_y} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \rho_{k_{\perp} k_z} \cdot \sigma_{fk_{\perp} k_z} \cdot e^{ikr_0} (ik) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ -\frac{1}{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} - \frac{1}{[ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]^2} + \frac{e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}}{[ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]^3} \right\} \sum_{n_z=-v_b}^v e^{-in_z k_z a_z} + \\ & + \frac{1}{m} \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|t} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \sum_{n_x, n_y=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \rho_{k_\perp k_z} \cdot \sigma_{f k_\perp k_z} e^{ikr_0} (ik)^2 \times \\ & \times \left\{ \frac{1 + e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}}{[ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]^2} + \frac{2[1 - e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]}}{[ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]^3} \right\} \sum_{n_z=-v_b}^v e^{-in_z k_z a_z}. \quad (\text{VI.11}) \end{aligned}$$

Вычисляя интегралы по  $k_z$  (см. § 3 этой главы) и пренебрегая при этом всюду малыми членами  $\frac{r_\perp^2}{z^2} \cos^2 \vartheta \ll 1$  (это есть следствие значительного удаления экрана от рассеивающей фольги), получим, оставляя второй член как главный, основное выражение:

$$\begin{aligned} \delta\rho_f(\mathbf{r}_\perp, z, t) = & - \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{m|z|^2} \frac{1}{a_x a_y} \int_{|\mathbf{r}|t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \times \\ & \times \sum_{n_z=1}^v \left( \frac{n_z a_z}{|z|} \right) \cdot \sum_{n_x, n_y=-\infty}^{+\infty} \frac{k_\perp^2}{k_\perp^2 + \kappa^2} \exp \left( -\frac{1}{2} \langle r_\perp^2 \rangle k_\perp^2 + i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}_\perp \frac{n_z a_z}{|z|} \right) \\ & (\langle r_\perp^2 \rangle = \frac{\theta}{U_{aa}} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} + \frac{\theta}{w_{aa}}). \quad (\text{VI.12}) \end{aligned}$$

Применяя к этой формуле метод суммирования Пуассона и сводя появляющийся при этом интеграл к специальной функции (см. § 3 настоящей главы), получим окончательную формулу для плотности распределения концентрации в рассеянном пучке:

$$\begin{aligned} \delta\rho_f(\mathbf{r}_\perp, z, t) = & \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m|z|} \int_{|\mathbf{r}|t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \sum_{n_z=1}^v \left( \frac{n_z a_z}{|z|} \right) \sum_{m_x, m_y=-\infty}^{+\infty} S_1(a, X) \kappa^2, \\ & (\text{VI.13}) \end{aligned}$$

$$S_1(a, X) = - \left[ \frac{1}{a} \exp \left( -\frac{X^2}{4a} \right) - e^a \int_0^\infty \exp \left( -t - \frac{X^2}{4t} \right) \frac{dt}{t} \right]$$

$$\left( X = \left| \mathbf{r}_\perp - (m_x a_x + m_y a_y) \frac{|z|}{n_z a_z} \right| \frac{n_z a_z}{|z|} \kappa, \quad a = \frac{1}{2} \langle r_\perp^2 \rangle \kappa^2 \right).$$

Специальная функция  $S_1(a, X)$ , выражающаяся через неполную цилиндрическую функцию Макдональда, определяет пространственную структуру рассеянного пучка в плоскости экрана и обладает следующими свойствами:

$$\int_0^{\infty} S_1(a, X) 2\pi X dX = 0,$$

$$S_1(a, X) \rightarrow \begin{cases} -\frac{1}{a^2} \exp\left(-\frac{X^2}{4a}\right) & \text{при } X \rightarrow 0, \\ 2e^a K_0(X) & \text{при } X \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (\text{VI.14})$$

$$S_1(a, X) \rightarrow \begin{cases} -2[\delta^*(X) - K_0(X)] \left(\int_0^{\infty} \delta^*(X) X dX = 1\right) & \text{при } a \rightarrow 0, \\ 2\left(\frac{X}{2a}\right)^2 [K_0(X) I_2(X) - K_2(X) I_0(X)] \exp\left(-\frac{X^2}{4a}\right) & \text{при } a \rightarrow \infty. \end{cases}$$

При получении асимптотических выражений удобно использовать теорию неполных интегралов Вебера.

Общий вид функции  $S_1(a, X)$  (рис. 11) соответствует «лунке с ореолом», известной из экспериментальных картин распределения интенсивности внутри областей каналирования. При малых  $X$  функция  $S_1(a, X) < 0$ , при больших значениях  $X$  функция  $S_1(a, X) > 0$  (табл. 3). Таким образом, имеет место непрерывный переход теневого эффекта в каналирование. Оба эффекта выступают как равноправные.

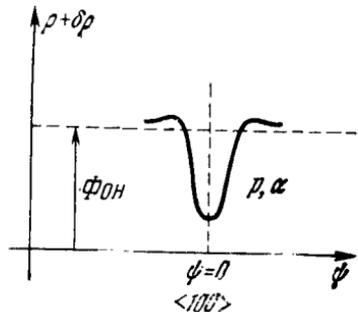


Рис. 11.

Функция  $\sum_{m_x, m_y=-\infty}^{+\infty} S_1(a, X)$  является периодической функцией координат точек на экране ( $r_{\perp}$ ) с основными периодами

$$d_x = a_x \frac{|z|}{n_z a_z}, \quad d_y = a_y \frac{|z|}{n_z a_z}, \quad (\text{VI.15})$$

воспроизводящими периоды кристалла, увеличенными на фактор подобия  $|z|/n_z a_z$ , где номер  $n_z$  определяет положение кристаллической плоскости как одной плоской решетки. Каждая подрешетка создает периодическую систему пятен на экране. Радиус пятен на экране определяется формулами:

$$\sigma_{\text{зат}} = \langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2} \frac{|z|}{n_z a_z}. \quad (\text{VI.16})$$

Таблица 3

Значения функций  $S_1(a, X)$ 

$X$	$S_1(0,5, X)$	$S_1(0,1, X)$	$X$	$S_1(0,5, X)$	$S_1(0,1, X)$
0	-1,077	-7,985	2,2	0,085	0,196
0,1	-1,070	-7,759	2,4	0,102	0,154
0,2	-1,049	-7,412	2,6	0,105	0,122
0,3	-1,014	-6,140	2,8	0,100	0,096
0,4	-0,966	-4,975	3,0	0,090	0,076
0,5	-0,907	-3,760	3,5	0,060	—
0,6	-0,840	-2,623	3,8	0,044	—
0,7	-0,765	-1,636	4,0	—	0,024
0,8	-0,685	-0,865	4,1	0,032	—
0,9	-0,603	-0,298	4,4	0,023	—
1,0	-0,520	0,083	4,7	0,017	—
1,2	-0,359	0,423	5,0	0,012	0,008
1,4	-0,216	0,462	5,3	0,009	—
1,6	-0,099	0,397	5,6	0,006	—
1,8	-0,011	0,318	6,0	—	0,003
2,0	0,049	0,250			

Радиус пятен приблизительно на порядок меньше периода плоской решетки на экране:

$$\frac{\sigma_{\text{зат}}}{d_x} = \frac{\langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2}}{a_x} \ll 1. \quad (\text{VI.17})$$

На основании этого неравенства пятна от каждой подрешетки не сливаются. Однако пятна от отдельных подрешеток с различными номерами  $n_z$ , накладываясь друг на друга, приводят к сливанию пятен. Координаты слившихся пятен характеризуются одинаковым отношением обертонов  $m_x$  и  $m_y$  с номером подрешеток  $n_z$ . Координаты пятен с наибольшим периодом и с периодом, в  $s$  раз меньшим, выражаются следующим образом:

$$x(\max d_x) = a_x \frac{|z|}{a_z} = 2a_x \frac{|z|}{2a_z} = \dots = \nu_a a_x \frac{|z|}{\nu_a a_z},$$

$$x\left(\frac{\max d_x}{s}\right) = a_x \frac{|z|}{s a_z} = 2a_x \frac{|z|}{2s a_z} = \dots = n_s a_x \frac{|z|}{n_s s a_z} \quad (\text{VI.18})$$

$$(\nu_a = n_s s + O(1, 2, \dots, s-1)).$$

Относительные интенсивности этих пятен определяются соответствующим членом в формуле для  $\delta r_f$  ( $r, z, t$ )

$$s \sum_1^{\nu_a/s} n_z. \quad (\text{VI.19})$$

Если расстояние между соседними пятнами от разных подрешеток будет достаточно мало, то пятна будут перекрываться и образовывать сплошные линии. Для этого необходимо:

$$\frac{2\sigma_{\text{зат}}}{\min \Delta x |s} = \frac{2 \langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2}}{a_x} (s - 1) > 1 \quad (\text{VI.20})$$

$$\left( \sigma_{\text{зат}} = \langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2} \frac{|z|}{a_z}, \quad \min \Delta \left( \frac{\max d_x}{s}, \frac{\max d_x}{s-1} \right) = a_x \frac{|z|}{a_z} \frac{1}{s(s-1)} \right).$$

Полученное условие осуществляется для  $s \gtrsim 5$ .

Перечисленные свойства поля рассеяния, диктуемые формулой для  $\delta r_f$ , приводят к следующим особенностям явления каналирования и явления затенения:

1. Наличие на экране системы периодически расположенных пятен с минимальной концентрацией частиц, непрерывно переходящей к максимуму концентрации. Максимум концентрации естественно отождествить с каналированием, а минимум концентрации — с явлением блокировки или «тени».

2. Наличие на экране, кроме изолированных пятен с максимально возможными интенсивностями (малые значения  $s$  в выражении (VI.19)), сплошных линий, в сечении которых также происходит чередование теневого эффекта и каналирования. Сплошные линии возникают за счет слияния пятен с достаточно большими значениями  $s$ , соответственно условию (VI.20). Интенсивность сплошных линий, получающихся в результате слияния пятен от разных подрешеток, имеет достаточную величину в сравнении с интенсивностью главных пятен. Для слияния пятен необходимо, на основании (VI.20), чтобы  $s \sim 5$ . Но на основании (VI.19) эти пятна имеют следующие относительные интенсивности:

$$\frac{J \left( \frac{\max d_x}{s} \right)}{J (\max d_x)} = \frac{v_a/s + 1}{v_a + 1} \approx \frac{1}{s} \sim \frac{1}{5} \quad (v_a \gg s), \quad (\text{VI.21})$$

что соответствует экспериментальным данным.

Кроме того, распределение концентрации частиц внутри пятен и линий, отображаемое единой функцией, объединяет явления каналирования и блокировки, которые обычно рассматриваются разрозненно.

Приведенные характерные свойства соответствуют наблюдению, однако развиваемая теория рассеяния в кристалле противоречит опытным данным в следующих отношениях.

Теоретическая величина угловой ширины пятен

$$\psi \approx \frac{\sigma_{\text{зат}}}{|z|} = \frac{\langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2}}{a_z} \frac{2}{v_a + 1} \quad (v_a \sim 10^4) \quad (\text{VI.22})$$

значительно меньше опытного значения и не зависит от энергии частиц пучка, что также противоречит эксперименту.

Теоретическая ширина пятен увеличивается с ростом температуры:

$$\langle r_{\perp}^2 \rangle = \frac{\theta}{U_{aa}} \left[ \int_{(\Omega)} \rho dr \right]^{-1} + \frac{\theta}{w_{aa}}; \quad (\text{VI.23})$$

данные же опыта указывают на обратную зависимость.

Теоретическая кривая распределения интенсивности внутри пятен и линий всегда симметрична относительно центра пятен или сплошных линий, так как  $S_1(a, X) = S_1(a, |X|)$ . На опыте же замечена асимметрия этих кривых.

Выявленные противоречия между опытом и теорией, основанной на трехмерной периодической структуре кристалла, мы постараемся полностью устранить в следующих параграфах, а пока рассмотрим встретившиеся интегралы.

### § 3. Вычисление некоторых интегралов

1. Приведем подробный вывод вида специальной функции  $S_1(a, X)$ . Применим к сумме в формуле (VI.12) для  $\delta r_f(r_{\perp}, z, t)$

$$\sum_{n_x, n_y = -\infty}^{+\infty} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp \left[ -\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2 + ik_{\perp} r_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \right] \quad (\text{VI.24})$$

формулу суммирования Пуассона

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} F(n, x_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(t, x_a) e^{2\pi i m t} dt;$$

имеем

$$\begin{aligned} \sum_{n_x, n_y = -\infty}^{\infty} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp \left( -\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2 + ik_{\perp} r_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \right) = \\ = \frac{a_x a_y}{(2\pi)^2} \sum_{m_x, m_y = -\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp \left( -\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2 + \right. \\ \left. + ik_{\perp} \mathbf{R}_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \right) dk_x dk_y; \quad (\text{VI.25}) \end{aligned}$$

здесь

$$\mathbf{k}_{\perp} \equiv \left( \frac{2\pi}{a_x} n_x, \frac{2\pi}{a_y} n_y \right), \quad \mathbf{R}_{\perp} = \mathbf{r}_{\perp} + (m_x a_x + m_y a_y) \frac{|z|}{n_z a_z}.$$

При вычислении интеграла по  $k_x$  и  $k_y$  введем цилиндрическую систему координат; используя выражение бesselевой функции

$$\int_0^{2\pi} \exp \left( ik_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \cos \vartheta \right) d\vartheta = 2\pi J_0 \left( k_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \right),$$

приходим к следующему интегралу:

$$\int_0^{\infty} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(k_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_{\perp} dk_{\perp},$$

который сводится к сумме двух:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_{\perp} dk_{\perp} = \\ & = \frac{1}{\langle r_{\perp}^2 \rangle} \exp\left[-\frac{\left(R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right)^2}{2 \langle r_{\perp}^2 \rangle}\right], \\ & - \kappa^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_{\perp} dk_{\perp}. \end{aligned}$$

Воспользуемся представлением

$$\frac{1}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} = \int_0^{\infty} e^{-(k_{\perp}^2 + \kappa^2)s} ds. \quad (\text{VI.26})$$

Изменяя порядок интегрирования во втором интеграле, находим

$$- \kappa^2 \frac{1}{2} \exp \frac{\langle r_{\perp}^2 \rangle \kappa^2}{2} \int_{\langle r_{\perp}^2 \rangle / 2}^{\infty} \exp\left[-\kappa^2 s - \frac{\left(R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right)^2}{4s}\right] \frac{ds}{s}.$$

В результате исходная двойная сумма (VI.24) равна

$$\kappa^2 \frac{a_x a_y}{(2\pi)^2} \pi \sum_{m_x, m_y = -\infty}^{+\infty} S_1(a, X), \quad (\text{VI.27})$$

$$S_1(a, X) = -\left[\frac{1}{a} \exp\left(\frac{X^2}{4a}\right) - e^a \int_0^{\infty} \exp\left(-t - \frac{X^2}{4t}\right) \frac{dt}{t}\right]$$

$$\left(X = R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \kappa, \quad a = \frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle \kappa^2\right).$$

2. Вычислим интеграл

$$\begin{aligned} J_1 = \int dk_z \left\{ -\frac{e^{ik(r-r_0)}}{[k(r-r_0)]^2} - \frac{1}{ik(r-r_0)} + \frac{1}{[k(r-r_0)]^2} \right\} \times \\ \times \sum_{n_z = -v_0}^v e^{-in_z a_z k_z}. \quad (\text{VI.28}) \end{aligned}$$

Подынтегральная функция не имеет особенностей. Для вычисления  $J_1$  разобьем интеграл на части, подынтегральные функции в которых имеют особенности. Условимся полюс обходить снизу, хотя окончательный результат не зависит от способа обхода полюса. Имеем

$$\begin{aligned}
 J_1 &= - \int dk_z \frac{e^{ik(r-r_0)}}{[k(r-r_0)]^2} \sum_{n_z=-v_b}^a e^{-in_z a_z k_z} - \\
 &- \int \frac{dk_z}{ik(r-r_0)} \sum_{n_z=-v_b}^a e^{-in_z a_z k_z} + \int \frac{dk_z}{[k(r-r_0)]^2} \sum_{n_z=-v_b}^a e^{-in_z a_z k_z} = \\
 &= \frac{2\pi}{(z-z_0)^2} \sum_{n_z=-v_b}^a (z-z_0-n_z a_z) e^{-in_z a_z k_z^*} - \\
 &- \frac{2\pi}{z-z_0} \sum_{n_z=-v_b}^{-1} e^{-in_z a_z k_z^*} + \frac{2\pi}{(z-z_0)^2} \sum_{n_z=-v_b}^{-1} n_z a_z e^{-in_z a_z k_z^*} = \\
 &= \frac{2\pi}{z-z_0} \sum_{n_z=1}^a \left(1 - \frac{n_z a_z}{z-z_0}\right) e^{-in_z a_z k_z^*} \quad (\text{VI.29}) \\
 &\left(k_z^* = - \frac{k_{\perp}(r_{\perp} - r_{\perp}^0)}{z-z_0}\right);
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_2 &= \int dk_z \left\{ \left[ \frac{1}{[ik(r-r_0)]^2} - \frac{2}{[ik(r-r_0)]^3} \right] e^{-ik(r-r_0)} - \right. \\
 &- \left. \frac{1}{[k(r-r_0)]^2} + \frac{2}{[ik(r-r_0)]^3} \right\} \sum_{n_z=-v_b}^a e^{-in_z a_z k_z} = \\
 &= \frac{2\pi}{(z-z_0)^2} \left\{ \sum_{n_z=-v_b}^a (z-z_0-n_z a_z) - \frac{1}{z-z_0} \sum_{n_z=-v_b}^a (z-z_0-n_z a_z)^2 - \right. \\
 &- \left. \sum_{n_z=-v_b}^a n_z a_z + \frac{1}{z-z_0} \sum_{n_z=-v_b}^a n_z^2 a_z^2 \right\} e^{-in_z a_z k_z^*} = \\
 &= \frac{2\pi}{(z-z_0)^2} \sum_{n_z=1}^a n_z a_z \left(1 - \frac{n_z a_z}{z-z_0}\right) e^{-in_z a_z k_z^*}.
 \end{aligned}$$

Здесь мы учли еще, что

$$\int F(k_z) \left\{ -\frac{e^{ik(r-r_0)}}{[k(r-r_0)]^2} - \frac{1}{ik(r-r_0)} + \frac{1}{[k(r-r_0)]^2} \right\} dk_z = 0,$$

если

$$\lim_{|k_z| \rightarrow \infty} |k_z|^\epsilon F(k_z) = 0, \quad \epsilon > 0.$$

3. В дальнейшем потребуется усреднение функции  $S_1(a, X)$  по тепловому разбросу скоростей  $v_\perp$ :

$$\int_{(\infty)} S_1(a, X(r_\perp - v_\perp \tau)) w_\perp \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) dv_\perp,$$

где

$$w \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) = \frac{m}{2\pi\theta_\perp} \exp \left( -\frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right), \quad \tau = \frac{z}{u}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} & \int_{(\infty)} S_1(a, X(r_\perp - v_\perp \tau)) w_\perp \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) dv_\perp = \\ & = \frac{m}{2\pi\theta_\perp} \iint_{(\infty)} dv_x dv_y \exp \left[ -\frac{m}{2\theta_\perp} (v_x^2 + v_y^2) \right] \left\{ e^a \int_a^\infty \exp \times \right. \\ & \times \left[ -t - \frac{(x - m_x d_x - v_x \tau)^2 + (y - m_y d_y - v_y \tau)^2}{4t} \left( \frac{n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \right] \frac{dt}{t} - \\ & - \frac{1}{a} \exp \left[ -\frac{(x - m_x d_x - v_x \tau)^2 + (y - m_y d_y - v_y \tau)^2}{4a} \left( \frac{n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \right] \left. \right\} = \\ & = e^a \int_a^\infty \exp \left\{ -t - \frac{(x - m_x d_x)^2 + (y - m_y d_y)^2}{4 \left[ t + \left( \frac{\tau n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \frac{\theta_\perp}{2m} \right]} \left( \frac{n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \right\} \times \\ & \times \frac{dt}{t + \left( \frac{\tau n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \frac{\theta_\perp}{2m}}{a + \left( \frac{\tau n_z a_z \kappa}{|z|} \right)^2 \frac{\theta_\perp}{2m}} = \\ & = e^{a_+} \int_{a_+}^\infty \exp \left( -p - \frac{X^2}{4p} \right) \frac{dp}{p} - \frac{1}{a_+} \exp \left( -\frac{X^2}{4a_+} \right) \equiv S_1(a_+, X), \end{aligned} \tag{VI.30}$$

$$\left( a_+ = a + \frac{\theta_\perp}{4E_0} (a_z n_z \kappa)^2, \quad E_0 = \frac{mu^2}{2} \right).$$

Таким образом, усреднение по тепловому разбросу частиц не изменяет вида специальной функции  $S_1(a, X)$ , изменяется только параметр  $a$ .

4. Найдем аналитические выражения для специальной функции при крайних значениях обоих ее параметров. Для этого используем аппарат неполных интегралов Вебера от модифицированных функций Бесселя [29]

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_\nu(a, x) &= \frac{1}{2a} e^a \int_0^x I_\nu(t) e^{-x^2/4t} t dt, \\ \tilde{\mathcal{P}}_\nu(a, x) &= \frac{1}{2a} e^a \int_0^x K_\nu(t) e^{-x^2/4t} t dt,\end{aligned}\tag{VI.31}$$

для которых имеет место соотношение

$$\begin{aligned}e^a \int_a^\infty \exp\left(-t - \frac{x^2}{4t}\right) \frac{dt}{t^{1+\nu}} = \\ = 2 \left(\frac{2}{x}\right)^\nu e^{-a} [K_\nu(x) \tilde{Q}_\nu(a, x) + I_\nu(x) \tilde{\mathcal{P}}_\nu(a, x)].\end{aligned}\tag{VI.32}$$

Используя свойства цилиндрических функций Бесселя  $I_\nu(x)$  и  $K_\nu(x)$  и асимптотические разложения неполных интегралов Вебера  $\tilde{Q}_\nu(a, x)$  и  $\tilde{\mathcal{P}}_\nu(a, x)$ , получаем следующие асимптотические представления для специальной функции:

$$S_1(a, X) \rightarrow \begin{cases} -2[\delta^*(X) - K_0(X)] & \text{при } a = 0, \\ 2e^a K_0(X) & \text{при } a \rightarrow 0, \\ 2\left(\frac{X}{2a}\right)^2 \cdot e^{-X^2/4a} [K_0(X) I_2(X) - K_2(X) I_0(X)] & \text{при } a \rightarrow \infty. \end{cases}\tag{VI.33}$$

Здесь  $\delta^*(X)$  — двумерная дельта-функция, для которой выполняется соотношение

$$\int_0^\infty \delta^*(X) X dX = 1,$$

причем

$$S_1(a, X) \rightarrow \begin{cases} -\frac{1}{a} - e^a \text{Ei}(-a) & \text{при } X = 0, \\ -\frac{1}{a^2} \exp\left(-\frac{X^2}{4a}\right) & \text{при } X \rightarrow 0, \\ 2e^a K_0(X) & \text{при } X \rightarrow \infty. \end{cases}\tag{VI.34}$$

Здесь  $\text{Ei}(-a)$  — интегральная показательная функция.

5. При рассмотрении рассеяния на пластинчатых структурах (см. § 4) появляется следующая сумма:

$$\sum_{n_x=-\infty}^{+\infty} \frac{k_x^2}{k_x^2 + \kappa^2} \frac{\sin k_x x \frac{a_z}{2|z|}}{k_x x \frac{a_z}{2|z|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle \bar{r}_\perp^2 \rangle k_x^2 + ik_x x \frac{n_z a_z}{|z|}\right), \quad (\text{VI.35})$$

где  $\langle \bar{r}_\perp^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \theta/w_{aa}$ .

Применяя формулу суммирования Пуассона, приходим к следующему выражению (VI.35):

$$\frac{\bar{a}_x}{2\pi} \sum_{m_x=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k_x^2}{k_x^2 + \kappa^2} \frac{\sin k_x x \frac{a_z}{2|z|}}{k_x x \frac{a_z}{2|z|}} \times \\ \times \exp\left[-\frac{1}{2} \langle \bar{r}_\perp^2 \rangle k_x^2 + i\left(x \frac{n_z a_z}{|z|} + \bar{a}_x m_x\right) k_x\right] dk_x. \quad (\text{VI.36})$$

Отметим, что в отличие от первого пункта, где появлялся двойной интеграл по  $k_x$  и  $k_y$ , здесь имеется простой интеграл по  $k_x$ . Это дает возможность провести дальнейшие вычисления по аналогии со случаем рассеяния на невозбужденной структуре кристалла. Используя тождество

$$\frac{1}{k_x^2 + \kappa^2} = \int_0^{\infty} e^{-(k_x^2 + \kappa^2)s} ds$$

и меняя порядок интегрирования по  $k_x$  и  $s$ , получаем, что анализируемый интеграл сводится к разности двух неполных цилиндрических функций Макдональда:

$$\frac{\bar{a}_x}{4\pi} \kappa \sqrt{\pi} \sum_{m_x=-\infty}^{+\infty} S_{3/2}(\bar{a}, x),$$

где новая специальная функция  $S_{3/2}(\bar{a}, x)$  равна

$$S_{3/2}(\bar{a}, x) = S_{3/2}(\bar{a}, X^-) - S_{3/2}(\bar{a}, X^+). \quad (\text{VI.37})$$

Эти функции определены следующим образом:

$$S_{3/2}(\bar{a}, X^\pm) = \left(n_z \pm \frac{1}{2}\right) \frac{X^\pm}{X^\pm |_{m_x=0}} e^{\bar{a}} \int_{\frac{\bar{a}}{X^\pm}}^{\infty} \exp\left(-t - \frac{X^\pm}{4t}\right)^2 \frac{dt}{t^{3/2}}. \quad (\text{VI.38})$$

Параметры функций равны

$$X^\pm = \left[x - m_x \frac{\bar{a}_x |z|}{(n_z \pm 1/2) a_z}\right] \frac{(n_z \pm 1/2) a_z}{|z|} \kappa, \\ \bar{a} = 1/2 \langle \bar{r}_\perp^2 \rangle \kappa^2.$$

#### § 4. Теория каналирования и эффекта теней на возбужденных состояниях кристалла

В предыдущих параграфах развивалась теория каналирования и эффекта теней в трехмерной модели кристалла на основе нелокально-статистического описания частиц пучка и частиц кристалла. На этом пути удается понять как общую картину возникновения пятен и линейных теней на протонограммах, так и функциональную зависимость распределения интенсивности частиц внутри пятен и сплошных линий.

Однако были вскрыты трудности в количественном описании ширины пятен и линий, в зависимости этих ширин от энергии падающих частиц и от температуры кристалла, а также в объяснении случаев асимметрии в распределении интенсивности почернения внутри пятен и сплошных линий. Кроме того, при рассмотрении рассеяния на кристаллических структурах отсутствует спектр энергии рассеянных частиц, падающих на фотопластинку. Эти трудности нельзя объяснить характером приближения исходной системы уравнений, так как высшие приближения учитывают отклонение прямой пропорциональности интенсивности рассеянных частиц от заряда частиц. Опыт же указывает на такую пропорциональность.

Для преодоления трудностей, с которыми мы встретились при анализе структуры поля рассеянных частиц, прошедших через кристалл, привлечем к рассмотрению нитевидные и пластинчатые структуры (см. главу III), предполагая, что они возбуждаются в кристалле самим пучком быстрых частиц. Существование этих структур одновременно с кристаллом возможно в разобобщенных областях, что не противоречит исходным нелинейным уравнениям в рассматриваемой модели кристалла.

Изменения результата рассеяния на нитевидных и пластинчатых структурах можно ожидать вследствие появления новых потенциалов, действующих на частицы пучка.

Рассмотрим сначала рассеяние на пластинчатых структурах, расположенных вдоль фиксированного направления невозмущенного потока частиц. Возбужденные пластинчатые структуры образовались из кристаллографических атомных плоскостей, отличающихся максимальной заселенностью атомов.

Потенциал структуры, действующий на частицы пучка, определяется аналогично § 2 следующей формулой:

$$U_f(x, z) = \sum_{n_x} e^{ik_x x} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \sum_{n_z=-v_b}^v e^{-ik_z n_z a_z} \right) \rho_{k_x k_z} \sigma_{f k_x k_z} e^{ik_z z} dk_z \quad (VI.39)$$

$$\left( k_x = \frac{2\pi}{a_x} n_x \right),$$

где

$$\rho_{k_x k_z} = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{1}{2\pi a_x a_y} \left( \frac{a_z}{d} \right) \frac{\sin(k_z a_z / 2)}{k_z a_z / 2} \exp \left[ -\frac{\theta}{2U_{aa}} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} k_x^2 \right],$$

$$\Omega = a_x a_y a_z, \quad \sigma_{fk_x k_z} = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{(k_x^2 + k_y^2) + \kappa^2}, \quad \frac{-4\pi G g^2}{(k_x^2 + k_y^2) + \kappa_g^2}.$$

Как и для случая тройкопериодической структуры кристалла, получим в качестве главного члена рассеяния

$$\overline{\delta\rho_f}(x, z, t) = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{V \pi Z_1 Z_2 e^3}{m |z|} \frac{1}{a_y} \int_{|r|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \times$$

$$\times \sum_{n_z=1}^a \left( \frac{n_z a_z}{|z|} \right) \sum_{m_x=-\infty}^{+\infty} [S_{3/2}(a, X^-) - S_{3/2}(a, X^+)] \kappa, \quad (\text{VI.40})$$

$$S_{3/2}(a, X^{\pm}) = \left( n_z \pm \frac{1}{2} \right) \frac{X^{\pm}}{X^{\pm}} \Big|_{m_x=0}^{\infty} e^a \int_a^{\infty} \exp \left( -t - \frac{X^{\pm 2}}{4t} \right) \frac{dt}{t^{3/2}},$$

$$X^{\pm} = \left[ x - m_x a_x \frac{|z|}{\left( n_z \pm \frac{1}{2} \right) a_z} \right] \frac{(n_z \pm 1/2) a_z}{|z|} \kappa, \quad a = \frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle \kappa^2.$$

Специальная функция  $S_{3/2}(a, X)$  имеет следующие свойства:

$$\int_0^{\infty} S_{3/2} \left[ a, \xi \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \right] d\xi = \int_0^{\infty} S_{3/2} [a, \xi (n_z - 1/2)] d\xi,$$

$$e^a \int_a^{\infty} \exp \left( -t - \frac{X^2}{4t} \right) \frac{dt}{t^{3/2}} \Big|_{X \rightarrow 0} \rightarrow \frac{1}{a^{3/2}} \exp \left( -\frac{X^2}{4a} \right),$$

$$e^a \int_a^{\infty} \exp \left( -t - \frac{X^2}{4t} \right) \frac{dt}{t^{3/2}} \Big|_{X \rightarrow \infty} \rightarrow 2 \left( \frac{2}{X} \right)^{1/2} e^a K_{1/2}(X).$$

Формула (VI.40) для  $\overline{\delta\rho_f}(x, z, t)$  приводит к системе периодически расположенных параллельных сплошных линий — следов минимума и максимума концентрации рассеянных частиц. Сплошность этих линий является следствием не перекрытия пятен, а обусловлена непрерывностью вероятности местоположения атомов в пластинчатых структурах.

Существенным отличием картины рассеяния частиц на пластинчатых структурах по сравнению с рассеянием ионов в кристалле является наличие асимметрии в распределении интенсивности почернения внутри линий, что обусловлено сдвигом специальных функций.

Рассмотрим вопрос о ширине сплошных линий. В кривой распределения интенсивности удобно ввести ширину двух областей — области каналирования и области затенения. Пользуясь асимптотическим представлением специальной функции, находим

$$\sigma_{\text{тени}} = \frac{\langle \bar{r}_1^2 \rangle^{1/2}}{a_z} \frac{|z|}{n_z + 1/2}, \quad \sigma_{\text{кан}} = \frac{1}{\kappa a_z} \frac{|z|}{n_z - 1/2}. \quad (\text{VI.41})$$

Величина этих ширин слишком мала, чтобы объяснить наблюдение. Кроме того, возникает противоречие между теорией и опытом в отношении зависимости ширин линий от энергии частиц пучка. Остается не снятым также противоречие в отношении отмеченной выше зависимости ширин линий от температуры.

Рассмотрим простейший случай поведения функции  $S_{3/2}(\bar{a}, x)$  в зависимости от  $x$  для центральной линии ( $m_x = 0$ ). В центре этой линии

$$S_{3/2}(\bar{a}, x)|_{x=0} = -\frac{1}{\bar{a}^{3/2}} \quad (\text{VI.42})$$

имеет место почернение. На больших удалениях от середины центральной линии

$$S_{3/2}(\bar{a}, x)|_{x \rightarrow \infty} = 4\sqrt{\pi} \frac{|z|}{a_z \kappa} \frac{\exp\left(-\frac{a_z n_z \kappa}{|z|} x\right)}{x} \text{sh}\left(\frac{a_z \kappa}{2|z|} x\right). \quad (\text{VI.43})$$

Следовательно, на фотопластинке центральная линия, темная внутри, будет по краям окаймлена светлым ореолом.

Специальная функция  $S_{3/2}(\bar{a}, \bar{X})$  для центральной линии протабулирована при  $n_z = 1$  для трех значений параметра  $\bar{a}$ : 0,1; 0,5; 1,5 (табл. 4). Параметр  $\bar{X}$  этой специальной функции определен

Таблица 4

Значения функции  $S_{3/2}(\bar{a}, \bar{X})$ 

$\bar{X}$	$\bar{a}$			$\bar{X}$	$\bar{a}$		
	0,1	0,5	1,5		0,1	0,5	1,5
0	-3,760	-0,974	-0,310	1,4	0,739	0,009	-0,123
0,1	-3,612	-0,964	-0,309	1,8	0,649	0,175	-0,050
0,2	-3,199	-0,934	-0,305	2	0,577	0,216	-0,018
0,3	-2,603	-0,887	-0,299	2,2	0,504	0,238	0,009
0,4	-1,931	-0,823	-0,290	2,4	0,436	0,246	0,032
0,5	-1,276	-0,747	-0,280	2,8	0,322	0,237	0,063
0,6	-0,702	-0,661	-0,267	3	0,276	0,225	0,073
0,7	-0,240	-0,569	-0,252	4	0,130	0,148	0,085
0,8	0,110	-0,474	-0,236	5	0,064	0,086	0,070
0,9	0,359	-0,380	-0,219	6	0,032	0,047	0,051
1	0,529	-0,289	-0,201	7	0,007	0,025	0,035
1,2	0,701	-0,124	-0,163	8	0,009	0,013	0,023

следующим образом:

$$\bar{X} = x \frac{a_z \kappa}{|z|}.$$

Он выбран с таким расчетом, чтобы удаление от середины центральной линии, получающейся при рассеянии на пластинчатых структурах кристалла, в радиальном направлении равнялось удалению от центра главного центрального пятна, получающегося при рассеянии на невозбужденном кристалле.

Из приведенной таблицы следует, что общий вид специальной функции  $S_{s/2}(\bar{a}, \bar{X})$  для центральной линии соответствует «лунке с ореолом».

Перейдем к рассмотрению рассеяния на нитевидных структурах. В полной аналогии со случаями рассеяния на кристаллической и пластинчатой структуре получаем, удерживая главный член:

$$\begin{aligned} \overline{\delta\rho_f}(x, z, t) = &= \left( \int_{(\bar{\Omega})} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{m |z|^2} \frac{a_z}{\bar{a}_x \bar{a}_y} \int_{|r|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \sum_{n_z=1}^{\nu} n_z \sum_{m_x, m_y=-\infty}^{+\infty} \frac{\bar{a}_x \bar{a}_y}{4\pi^2} \times \\ &\times \iint_{(\infty)} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \frac{\sin k_{\perp} r_{\perp}}{k_{\perp} r_{\perp}} \frac{a_z}{2|z|} \exp \left[ -\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2 + \right. \\ &\left. + i \left( k_{\perp} r_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} + m_x \bar{a}_x k_x + m_y \bar{a}_y k_y \right) \right] dk_x dk_y \quad (\text{VI.44}) \\ & \left( \bar{\Omega} = \bar{a}_x \bar{a}_y a_z, \quad \bar{a} = \frac{1}{2} \langle \bar{r}_{\perp}^2 \rangle \kappa^2 \right). \end{aligned}$$

Двойной интеграл в (VI.44) не поддается дальнейшему упрощению.

Рассеяние на нитевидных структурах приводит к системе периодически расположенных пятен в плоскостях, перпендикулярных оси  $z$ . Несмотря на строгую симметрию самих нитевидных структур, наиболее удивительным свойством является сложная зависимость распределения интенсивности внутри пятен от азимутального угла, что могло бы служить указанием для эксперимента.

Максимальная интенсивность почернения в пятнах, получающихся при рассеянии на нитевидных структурах кристалла, превышает только в несколько раз максимальную интенсивность почернения в сплошных линиях от пластинчатых структур. Однако для ширины пятен, получающихся при рассеянии от стол-

биков, сохраняется несоответствие с опытом (по порядку величины) зависимости ширин пятен от энергии частиц пучка и от температуры.

Устранению этих противоречий, имеющих место и для рассеяния на пластинчатых структурах, будет посвящен следующий параграф.

### § 5. Температурные распределения в пучке при наличии возбужденных структур

Отказываясь от использования локальных образов в поведении частиц в явлениях каналирования и теней и переходя на язык непрерывных вероятностей местоположений и кинематических свойств частиц как первичных понятий теории, удастся единообразно описать явления каналирования, блокировки и протонограммы, полностью устраняя ранее возникшие трудности.

Нелокально-статистическое описание частиц в пучке, атомов в кристалле и взаимодействий между ними опирается на систему уравнений для функций распределения

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} + v \nabla_r f - \frac{1}{m} \nabla_r [U_f(r) + Z_1 e \varphi(r)] \nabla_v f &= 0, \\ U_f(r) &= \int K_f(|r - r'|) \rho(r') dr', \quad \Delta \varphi = -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f dv, \\ \rho[r \in (abc)^{(h)}] &= \\ &= \left( \int_{(abc)^{(h)}} \rho dr \right) \cdot (a^{\delta_{1h}} b^{\delta_{1h} + \delta_{2h}})^{-1} \prod_{\alpha=1}^h (2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle^{(h)})^{-1/2} \exp\left(-\frac{x_\alpha^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle^{(h)}}\right). \end{aligned} \quad (\text{VI.45})$$

Здесь  $h = 3, 2, 1$  — число измерений для кристалла и его возбужденных состояний (трехмерные, двумерные и одномерные периодические структуры),

$$\begin{aligned} K_f(|r - r'|) &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|r - r'|} e^{-\kappa|r - r'|}, \\ a_0 &= \frac{1}{\kappa} = a_B \cdot 0,8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}. \end{aligned} \quad (\text{VI.46})$$

Рассмотрим сначала явление каналирования ионов в монокристаллических фольгах (на прострел), ставя задачу отыскания адекватных решений у системы для  $f, U_f, \rho$ .

Наложим естественные условия на решение:

1. Условие гладкости — для произвольного объема  $\Delta V$  в пучке вероятное число частиц

$$\int_{(\Delta V)_{(\infty)}} f dr dv$$

не обязано принадлежать множеству целых чисел.

Отказ от целочисленности позволяет нам выйти из класса локальных решений типа

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{s=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_s(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{v}_s(t)].$$

2. Условие стационарности  $\partial f / \partial t = 0$ .

3. Выполнение принципа статистической независимости

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r}) w(v^2).$$

4. Наличие трансляции частиц в пучке, совместимое с предыдущими условиями:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r}) w[(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2], \quad \mathbf{u} = \text{const.} \quad (\text{VI.47})$$

**Т е о р е м а 1.** Решений указанного вида не существует в трехмерном кристалле. Это вытекает из невозможности удовлетворить системе уравнений для  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ ,  $U_f(\mathbf{r})$  функцией типа (VI.47) при  $\mathbf{u} \neq 0$ . В самом деле, используя (VI.47), получим условие разрешимости в виде

$$\mathbf{v} \frac{\nabla_{\mathbf{r}} \rho_f \cdot \mathbf{w} - \frac{2}{m} \nabla_{\mathbf{r}} U \rho_f \cdot \mathbf{w}'}{\frac{2}{m} w' \rho_f} = -(\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{r}} U), \quad (\text{VI.48})$$

где

$$w' = \frac{\partial w}{\partial [(v - \mathbf{u})^2]}, \quad U(\mathbf{r}) \equiv U_f(\mathbf{r}) + Z_1 e \varphi(\mathbf{r}). \quad (\text{VI.49})$$

Этому условию невозможно удовлетворить, так как  $\mathbf{v}$  является независимой переменной.

Теорема теряет силу в случае независимости действующего потенциала  $U$  от одной или двух координат.

**Т е о р е м а 2.** В случае наличия в фольге нитевидных или пластинчатых структур возникает точное решение, удовлетворяющее предыдущим условиям:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = C w_{\parallel} [(v_z - v_0)^2] \exp \left[ -\frac{U_f(\mathbf{r}_{\perp}) + Z_1 e \varphi(\mathbf{r}_{\perp})}{\theta_{\perp}} - \frac{m v_{\perp}^2}{2 \theta_{\perp}} \right], \quad (\text{VI.50})$$

$$U_f(\mathbf{r}_{\perp}) = \int K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}'_{\perp}) d\mathbf{r}'_{\perp} dz', \quad \Delta \varphi(\mathbf{r}_{\perp}) = -\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f d\mathbf{v}.$$

Средняя скорость потока направлена вдоль структур. Параметр разделения переменных  $\theta_{\perp}$  является поперечной температурой в пучке. Функция  $w_{\parallel}$  теорией не определяется.

Одномерные и двумерные структуры должны возбуждаться в кристалле ионами пучка. Один ион с энергией в 1 Мэв в состоянии создать блок из подобных структур в 300 Å<sup>3</sup>.

**Т е о р е м а 3.** Стационарные решения имеются и у нестационарных уравнений, связывающих функцию распределения частиц пучка  $f_1$  с функцией распределения атомов указанных структур  $f_2$ , вследствие чего не реализуется процесс выравнивания температур между пучком и структурами даже в случае  $\theta_1 \gg \theta_2$ .

Система уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f_1 - \frac{1}{m_1} \nabla_r (U_{12} + Z_1 e \varphi) \nabla_v f_1 &= 0, \\ \Delta \varphi &= -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f_1 d\mathbf{v}, \\ \frac{\partial f_2}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f_2 - \frac{1}{m_2} \nabla_r (U_{21} + U_{22}) \nabla_v f_2 &= 0, \end{aligned} \quad (\text{VI.51})$$

$$U_{\alpha\beta} = \int K_{\alpha\beta}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_\beta d\mathbf{r}' d\mathbf{v}, \quad \frac{\partial K_{\alpha\beta}}{\partial t} = 0, \quad \alpha, \beta = 1, 2,$$

имеет точное стационарное решение для  $f_1$  и  $f_2$  с  $\theta_1 \neq \theta_2$ . Эти параметры оказываются независимыми.

Сохраняемость «ядер»  $K_{\alpha\beta}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  при наличии трансляции ионов обусловлена тем, что система

$$\begin{aligned} \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Z_2 e^2}{|\mathbf{s}|} + (-e)(\varphi_e + \varphi_1 + \varphi_2) \right] \psi_r(\mathbf{s}) &= 0, \\ \Delta \varphi_e &= -4\pi Z_2 (-e) \psi_r^*(\mathbf{s}) \psi_r(\mathbf{s}), \quad \Delta \varphi_1 = -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f_1 d\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (\text{VI.52})$$

$$\Delta \varphi_2 + \kappa^2 \varphi_2 = -4\pi Z_2 e \int_{(\infty)} f_2 d\mathbf{v},$$

имеет стационарные решения и для электронных состояний атомов в структурах.

С л е д с т в и я т е о р е м. 1. Верхняя граница для  $\theta_\perp$ . Условие стационарности распределения требует выполнения неравенства  $\theta_\perp \leq \max U_f(\mathbf{r}_\perp)$ . Действующий на частицы пучка потенциал  $U_f$  определяется через плотность  $\rho(\mathbf{r})$ . Для случая нитевидных структур имеем

$$\bar{\rho}(\mathbf{r}_\perp) = \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{1}{d} \prod_{\alpha=1}^2 (2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle)^{-1/2} \exp \left( -\frac{x_\alpha^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle} \right). \quad (\text{VI.53})$$

Рассмотрим два предельных случая: низких и не слишком низких температур в структурах:

$$1) \frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \gg 1 \quad \text{и} \quad 2) \frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \ll 1.$$

Возникает два вида разложений. Для первого случая имеем

$$U_f^{(1)}(\mathbf{r}_\perp) = \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \left( 1 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 \langle x_{\alpha\perp}^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 + \dots \right) \bar{K}_f(|\mathbf{r}_\perp|),$$

$$\langle x_{\alpha\perp}^2 \rangle = \frac{\int x_{\alpha\perp}^2 \bar{\rho}(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}}{\int \bar{\rho}(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}}, \quad (\text{VI.54})$$

$$\bar{K}_f(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) = \frac{1}{d} \int_{(\infty)} K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) dz' = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} K_0(\kappa |\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|),$$

где  $K_0(t)$  — цилиндрическая функция Макдональда,  $d$  — период иодного кристалла в направлении нитей.

Для второго случая получается аналогичное разложение.

Максимальная величина потенциального барьера для нитевидных структур имеет вид

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \leq \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \frac{2a_0}{\gamma \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}}, \quad (\text{VI.55})$$

$$\bar{\theta}_\perp^{(2)} \leq \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} \left( \frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right) \exp \left( - \frac{a_0^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle} \right).$$

В случае пластинчатых структур получаем

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \leq \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{d} \left( \frac{a_0}{d} \right) \exp \left( - \frac{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}}{a_0} \right),$$

$$\bar{\theta}_\perp^{(2)} = \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \right) \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{d} \left( \frac{a_0}{d} \right) \left( \frac{a_0^2}{2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle} \right)^{1/2} \exp \left( - \frac{a_0^2}{2 \langle x_\alpha^2 \rangle} \right). \quad (\text{VI.56})$$

Для случая вольфрама и протонов, полагая

$$\int_{(abc)} \bar{\rho} d\mathbf{r} \approx 1, \quad d = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad \left( \frac{2a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right)^{(1)} = 3, \quad \left( \frac{2a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right)^{(2)} = \frac{1}{3},$$

имеем для поперечных температур пучка в нитевидных структурах

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \leq 780 \text{ эв}, \quad \bar{\theta}_\perp^{(2)} \leq 253 \text{ эв}. \quad (\text{VI.57})$$

Для пластинчатых структур значения для поперечных температур пучка приблизительно на порядок меньше соответствующих значений для нитевидных структур.

Сплошность и значительная высота потенциальных барьеров обеспечивают эффективность процесса каналирования ионного пучка между возбужденными структурами.

2. *Угловой спектр.* После выхода частиц из фольги потенциальные барьеры перестают действовать на них. Поперечный температурный разброс скоростей приводит к спектру углов, наблюдаемых экспериментально.

Ограничиваясь малыми концентрациями пучка и используя теорему 2, с учетом  $v_{\perp}/v_0 = \operatorname{tg} \psi$  получаем

$$f(r, v, t) = Cw_{\parallel} \left( \left[ v_z - \left( \frac{2E_0}{m} \right)^{1/2} \right]^2 \right) \exp \left[ - \frac{E_0}{\theta_{\perp}} \operatorname{tg}^2 \psi \right]. \quad (\text{VI.58})$$

Здесь  $E_0$  — кинетическая энергия частиц в направлении центра пятна.

Имеем для случая нитевидных структур

$$\langle \operatorname{tg}^2 \psi \rangle^{(1)} = \frac{\bar{\theta}_{\perp}^{(1)}}{2E_0} \ll \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} dr \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0 d} \ln \frac{2a_0}{\gamma \langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}}, \quad (\text{VI.59})$$

$$\langle \operatorname{tg}^2 \psi \rangle^{(2)} = \frac{\bar{\theta}_{\perp}^{(2)}}{2E_0} \ll \left( \int_{(abc)} \bar{\rho} dr \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0 d} \frac{a_0}{\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}} \exp \left( - \frac{a_0^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle} \right).$$

В случае пластинчатых структур получаем аналогичный результат для углового распределения частиц пучка, но «поперечная» температура определяется формулами для  $\bar{\theta}_{\perp}^{(1)}$  и  $\bar{\theta}_{\perp}^{(2)}$ .

3. *Энергетический спектр.* Для каждой частицы пучка  $v^2 = v_{\perp}^2 + v_0^2 = v_0^2 (1 + \operatorname{tg}^2 \psi)$ , поэтому спектр по энергиям тесно связан с угловым спектром:

$$f(r, v, t) = Cw_{\parallel} \left( \left[ v_z - \left( \frac{2E_0}{m} \right)^{1/2} \right]^2 \right) \exp \left[ - \frac{U_f(r_{\perp} - v_{\perp} t)}{\theta_{\perp}} - \frac{E_0}{\theta_{\perp}} \left( \frac{E - E_0}{E_0} \right) \right]. \quad (\text{VI.60})$$

Среднее отклонение в энергии частиц и связь энергетического спектра с угловым таковы:

$$\left\langle \frac{E - E_0}{E_0} \right\rangle = \frac{\theta_{\perp}}{E_0}, \quad E = E_0 (1 + \operatorname{tg}^2 \psi). \quad (\text{VI.61})$$

Функция распределения по энергиям оказывается асимметричной, так как всегда  $E \geq E_0$ .

4. *Устранение возникшего противоречия.* Развитая в §§ 1—3 теория рассеяния частиц с центром излучения внутри кристалла находилась в противоречии с опытом в отношении полуширин пятен и сплошных линий, так как отсутствовала зависимость полуширин от энергии частиц пучка и получалась неправильная зависимость от температуры кристалла.

Нелокально-статистическая теория кристалла позволяет снять это противоречие, привлекая к рассмотрению возбужденные состояния кристалла в виде блоков из нитевидных и пластинчатых

структур, на которых происходит дополнительное рассеяние частиц. Переход частиц пучка из области тройкопериодического кристалла в блок из возбужденных структур, ориентированных вдоль направления движения частиц, характеризуется, во-первых, ослаблением влияния условий в источнике частиц, во-вторых, сохранением пространственной структуры пучка при прохождении его через указанные структуры и, в-третьих, возникновением поперечного температурного разброса частиц пучка, движущихся внутри структур, на основании теоремы 2.

После выхода частиц из кристалла температурный разброс, оформившийся внутри возбужденных структур, приводит к дополнительному рассеянию частиц, значительно превышающему разброс, обусловленный только тройкопериодической структурой кристалла. Получающееся новое значение полуширины пятен и сплошных линий полностью устраняет оставшееся противоречие теории с экспериментом.

Количественное описание указанного механизма опирается на функцию распределения частиц вне кристалла, учитывающую вышеуказанные особенности при прохождении частиц через блоки из возбужденных структур. Вблизи анализатора функция распределения частиц пучка принимает вид

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \delta r_f(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{v}_\perp \tau, z - v_z \tau, \tau) w_\perp \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) \cdot w_\parallel (|v_z - v_0|^2), \quad (\text{VI.62})$$

$$w_\perp \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) = \frac{m}{2\pi\theta_\perp} \exp \left( - \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right),$$

где  $\delta r_f$  определена в § 2. В  $\delta r_f$  координаты входят только в специальную функцию  $S_1(a, X)$ , даваемую (VI. 27).

Температурный разброс, проявляющийся в сдвигах аргументов у функции  $\delta r_f$ , приводит к усреднению функции  $S_1(a, X)$ . Результат усреднения специальной функции  $S_1$  не изменяет ее вида, а только меняет значение параметра  $a$  (см. § 3):

$$\int_{(\infty)} S_1(a, X[\mathbf{r}_\perp - \mathbf{v}_\perp \tau]) w_\perp \left( \frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) d\mathbf{v} = S_1(a_+, X),$$

$$a_+ = \frac{1}{2} \left[ \langle r_\perp^2 \rangle + \frac{\theta_\perp}{2E_0} (n_z a_z)^2 \right] \kappa^2$$

$$(\tau = z/v_0, E_0 = mv_0^2/2).$$

Изменение параметра  $a$  приводит к новому значению для угловой полуширины пятен и линий:

$$\langle \text{tg}^2 \psi \rangle = \theta_\perp / 2E_0, \quad (\text{VI.63})$$

где  $\theta_\perp$  определяется полученными выше формулами,

Формула (VI.63) снимает указанное противоречие как в отношении зависимости полуширин от энергии частиц, так и в отношении температуры кристалла и порядковых номеров  $Z_1$  и  $Z_2$ . Эта формула точно совпадает с аналогичной формулой для случая каналирования на прострел.

Полученные значения для угловых полуширин пятен и линий существенно зависят от упругих постоянных структур кристалла. С увеличением коэффициента упругости, входящего в  $\langle x_a^2 \rangle$ , ширина пятен и линий возрастает.

Распределение частиц по энергиям внутри пятен и линий в явлениях блокировки и протонограммах рассматривается вполне аналогично явлениям на «прострел». При перемещении вдоль радиуса пятен и попереk сплошных линий энергия частиц меняется. На периферии пятен и сплошных линий энергия частиц больше, чем в центре. Средняя энергия частиц в пятнах больше, чем в сплошных линиях.

Необходимость существования в трехмерном кристалле блоков из нитевидных или пластинчатых структур, обеспечивающих важные детали рассеяния частиц в явлениях каналирования, блокировки и протонограммах, — предсказание единой теории этих явлений.

## § 6. Общность природы пятен Венера и блокировочного эффекта (при прохождении частиц через монокристаллы)

Существуют три обстоятельства, являющиеся основанием гипотезы об общности механизма явления распыления атомов монокристаллов, приводящего к пятнам Венера, с одной стороны, и эффекта блокировки движения ионов в направлении главных кристаллографических осей, с другой.

1. В обоих случаях существует находящийся внутри кристалла центр излучения (или рассеяния) частиц.

2. В обоих случаях основную роль играют отталкивательные силы взаимодействия между движущимися частицами и атомами кристалла.

3. Имеется замкнутый аппарат, описывающий перемещения произвольных частиц в заданном периодическом поле кристалла и развитый в предыдущих параграфах. В этом аппарате конкретизация природы частиц (атомы, ионы) сказывается только на законе их взаимодействия с кристаллом, т. е. на потенциальной энергии взаимодействия  $K(|r - r'|)$ . Статистический механизм, описывающий перемещение частиц, является общим.

Естественно возникает вопрос, не являются ли качественные различия между пятнами Венера и лунками блокировок следствием лишь количественного различия в параметре, характеризую-

щем силы отталкивания между атомами кристалла и движущимися частицами в обоих случаях.

Если указанный параметр определяется кинетической энергией частиц, то при изменении энергии частиц, проходящих через кристалл, должен существовать непрерывный переход пятен Венеры в лунки блокировок.

Возникает задача о распространении теории, развитой выше для явлений блокировок и каналирования, на объяснение явлений пятен Венеры.

Для решения этой задачи необходимо прежде всего выяснить возможность получить формулы для рассеяния частиц монокристаллическим слоем, освобождаясь от ограничивающих предположений, связанных с конкретизацией сил взаимодействия между движущимися частицами (ионами) с атомами кристалла.

Исходная система уравнений для функции  $f$  распределения частиц в пучке, вероятности  $\rho$  местоположения атомов в кристалле и взаимодействия между частицами пучка и атомами кристалла дается формулами (VI.1), (VI.2).

Фигурирующие в (VI.1)  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  и  $K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — потенциалы парного взаимодействия движущейся частицы с атомами кристалла, находящимися в точках  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$ , и двух атомов кристалла (друг с другом) в условиях равновесного состояния.

Конкретизация природы перемещающихся частиц всецело определяется энергией взаимодействия  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ , поэтому исходные уравнения правомерны для движения через заданную кристаллическую структуру как ионов, так и нейтральных атомов.

Зависимость взаимодействия  $K_f$  от кинетической энергии частиц будет конкретизирована ниже.

Источник частиц (заряженных или нейтральных) описывается в первом уравнении справа заданной функцией распределения  $\Phi(|\mathbf{v}|)$  скоростей частиц у источника и гауссовским распределением своего положения в окрестности начала координат.

Исходная система уравнений позволяет определить функцию распределения движущихся через кристалл частиц по заданным характеристикам источника, структуре кристалла, по виду взаимодействия всех частиц между собой. Геометрическое положение кристаллической пластины, центра расхождения пучка и положение коллектора представлено на рис. 12.

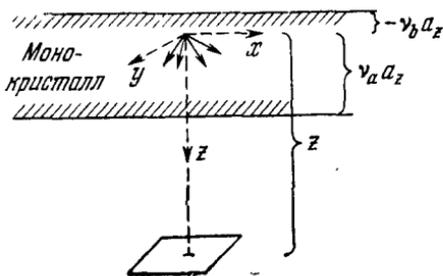


Рис. 12.

Если  $a_z$  — длина элементарной ячейки в направлении оси  $z$ , то толщина кристалла в направлении выхода частиц есть  $\nu_a a_z$ , где  $\nu_a$  — максимальное число плоских подрешеток в кристалле, через которые проходит частица. Аналогично  $\nu_b a_z$  определяет расстояние от центра расхождения до задней границы кристалла.

Распределение плотности вероятности  $\rho(\mathbf{r})$  местоположения атомов в кристалле определено в § 2. Применительно к ограниченной пластине оно определяется формулой (VI.10).

Решение для функции  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  распределения частиц пучка, движущегося через кристалл, будем искать в виде ряда последовательных приближений по параметру, пропорциональному интенсивности атомных и атом-ионных взаимодействий (в последнем случае пропорциональному заряду ионов пучка),  $U_f \rightarrow \varepsilon U_f$ ,  $e\Phi \rightarrow \varepsilon e\Phi$ :

$$f = f_0 + \varepsilon f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad \Phi = \varepsilon \varphi^{(1)} + \varepsilon^2 \varphi^{(2)} + \dots \quad (\text{VI.64})$$

Основания отыскивать решение в виде ряда по  $\varepsilon$  изложены в § 1. Здесь мы ставим задачу получения решения распределения концентрации в пучке частиц, прошедших через кристалл, не специализируя энергию парного взаимодействия  $K_f$  с целью выяснения чувствительности картины рассеяния к изменению энергии частиц пучка, входящей, по основному предположению, в функциональную форму  $K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Идя прежним путем (аналогично § 1), получаем

$$\int_{(\infty)} f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = \rho^{(1)}(\mathbf{r}, t),$$

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, t) = - \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r}' \right) \frac{1}{mz^2} \frac{a_z}{a_x a_y} \int_{|\mathbf{r}'|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \times$$

$$\times \sum_{n_z=1}^{\nu_a} n_z \sum_{n_x, n_y=-\infty}^{\infty} \sigma_f(k_{\perp}) k_{\perp}^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2 + i k_{\perp} \mathbf{r}_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right),$$

(VI.65)

где

$$\sigma_f(k_{\perp}) = 4\pi \int K_f(s) \frac{\sin k_{\perp} s}{k_{\perp} s} s^2 ds,$$

$$\langle r_{\perp}^2 \rangle = \frac{\theta}{w_{aa}} + \langle x_a^2 \rangle.$$

Удобно преобразовать полученную формулу для  $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ , используя для двойной суммы по  $n_x$  и  $n_y$  формулу суммирования

Пуассона:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{z}, t) = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{1}{mz^2} \frac{a_z}{2\pi} \int_{|r|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \sum_{n_z=1}^{\nu a} n_z \sum_{m_x, m_y=-\infty}^{\infty} S(R_\perp), \quad (\text{VI.66})$$

$$R_\perp = \left| \mathbf{r}_\perp + (m_x a_x + m_y a_y) \frac{|z|}{n_z a_z} \right| \frac{n_z a_z}{|z|},$$

где фигурирующая в (VI.66) функция  $S(R_\perp)$  определяется формулой

$$S(R_\perp) = - \int_0^{\infty} k_\perp^2 \sigma(k_\perp) \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_\perp^2 \rangle k_\perp^2\right) J_0\left(k_\perp R_\perp \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_\perp dk_\perp. \quad (\text{VI.67})$$

Отметим характерные черты полученной формулы для распределения концентрации частиц в пучке, прошедшем через кристалл.

1. Полученная формула выведена при условии, когда радиус  $r_\perp$  эффективности зоны сосредоточения пучка в плоскости сечения мал в сравнении с расстоянием  $z$  до коллектора, т. е.

$$|r_\perp| \lesssim \frac{1}{\gamma} z, \quad \gamma \gg 1, \quad (\text{VI.68})$$

где  $\gamma$  — эмпирический коэффициент, определяющий особенность экспериментальной установки. Численное значение этого коэффициента может определить максимально возможное число пятен Венеры.

Из выражения для  $R_\perp$  видно, что двойная сумма

$$\sum_{m_x, m_y=-\infty}^{\infty} S\left[\left|\mathbf{r}_\perp + (m_x a_x + m_y a_y) \frac{|z|}{n_z a_z} \right| \frac{n_z a_z}{|z|}\right]$$

представляет собой периодическую функцию в плоскости  $(x, y)$ .

В точках  $\mathbf{r}_\perp = -(m_x a_x + m_y a_y) \frac{|z|}{n_z a_z}$ , где  $m_x, m_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , функция  $S(R_\perp)$  имеет экстремумы. В случаях, когда расстояние между соседними экстремумами

$$(d_x d_y) = (a_x, a_y) \frac{|z|}{n_z a_z}$$

превышает эффективную ширину функции  $S(R_\perp)$ , двойная сумма описывает систему изолированных периодически расположенных в плоскости коллектора пятен.

Тройная сумма в (VI.66)  $\sum_{n_z=1}^{v_a} n_z \sum_{m_x, m_y=-\infty}^{\infty} S(R_{\perp})$  представляет результат наложения пятен от разных подрешеток, полное число которых равно  $v_a$ . Каждая из этих подрешеток дает пятна с различным периодом, шириной и интенсивностью.

Специальная функция  $S(R_{\perp})$  связана с распределением интенсивности в пятне, обусловленным одним атомом, находящимся в подрешетке с номером  $n_z$  и удаленным от оси  $z$  на расстояние  $(m_x a_x + m_y a_y)$ . Фактор  $|z|/n_z a_z$  указывает на увеличение масштаба при проектировании пучком плоских подрешеток на плоскость коллектора.

Специальная функция  $S(R_{\perp})$  содержит информацию об основных параметрах явления рассеяния частиц кристаллом: силовом взаимодействии между частицами пучка и атомами кристалла, включающем зависимость от кинетической энергии частиц пучка, периоде кристалла  $a_x, a_y, a_z$ , величине суммарного теплового разброса атомов около узлов кристалла и гауссовском разбросе центра расхождения пучка

$$\langle r_{\perp}^2 \rangle = \frac{\theta}{U_{aa}} \left( \int_{(\Omega)} \rho dr \right)^{-1} + \frac{\theta}{w_{ta}},$$

где  $U_{aa}$  и  $w_{aa}$  — упругие коэффициенты, характеризующие потенциальные ямы в окрестности узлов кристалла и центра источника соответственно.

Таким образом, функция  $S(R_{\perp})$  содержит основную информацию о распределении плотности вышедших из кристалла частиц в окрестности главных кристаллографических направлений, а также включает в себя параметр, зависящий от кинетической энергии частиц. При условии зависимости  $S(R_{\perp})$  от параметра  $r_0$  возникает, в принципе, возможность получения качественного различия в картинах рассеяния при непрерывном изменении кинетической энергии частиц, движущихся через кристалл.

В следующем параграфе доказывается, что указанное качественное различие соответствует непрерывному переходу пятен Венера в блокировочные лунки.

### § 7. Непрерывный переход явления пятен Венера в эффект блокировки (при увеличении кинетической энергии частиц, проходящих через монокристалл)

Для учета отталкивательного взаимодействия движущихся частиц (нейтральных или заряженных) с атомами кристалла воспользуемся экранированным потенциалом, вводя в него непроницаемую сферу с крутым подъемом потенциала и с эффективным радиусом, зависящим от кинетической энергии частиц. Такое

представление является правомерным для кинетических энергий сближения, превышающих энергию связи движущихся частиц с атомами кристалла:

$$K_f(r) = \frac{G}{r} e^{-\kappa r} \quad \text{при} \quad r > r_0,$$

$$\lim_{r \rightarrow r_0} \partial_r^n K_f(r) \rightarrow \infty \quad \text{при} \quad r \geq r_0, \quad n = 1, 2,$$

$$\frac{G}{r_0} e^{-\kappa r_0} = mv^2/2,$$

где для ионов (на основании теории Томаса — Ферми)  $G = Z_1 Z_2 e^2$ ,  $\kappa^{-1} = a_B \cdot 0,8853 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-1/2}$ ; для атомов указанные параметры справедливы только по порядку величин.

Поведение функции распределения движущихся частиц определяется интегральной формой взаимодействия частиц пучка с атомами кристалла, которое описывается размытым распределением местоположения атомов  $\rho(r)$ :

$$U_f(r) = \int K_f(|r - r'|) \rho(r') dr. \quad (\text{VI.69})$$

Рассмотрим это взаимодействие с одной из элементарных ячеек кристалла номера  $(n_x, n_y, n_z)$ . Для этого случая  $U_f(r)$  выражается так:

$$U_f(r) = \left( \int_{(\Omega)} \rho dr \right) \left[ K_f(r - na) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \langle x_\alpha^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 K_f(r - na) + \dots \right],$$

$$(\text{VI.70})$$

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \int_{(\Omega)} x_\alpha^2 \rho dr / \int_{(\Omega)} \rho dr, \quad na \equiv n_x a_x + n_y a_y + n_z a_z.$$

Сопоставляя условие на  $K_f(r)$  и выражение для  $U_f(r)$ , находим

$$\nabla_r U_f(r) \Big|_{|r-na| \rightarrow r_0} \rightarrow \infty.$$

Это условие, в свою очередь, накладывает ограничение на поведение функции  $f(r, v, t)$  при  $|r - na| \rightarrow +r_0$ . Из исходного уравнения для этой функции

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla_r f - \frac{1}{m} \nabla_r U_f \nabla_v f = \Phi(|v|) \left( \frac{w_{aa}}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{w_{aa}}{2\theta} r^2\right)$$

вытекает

$$\nabla_r f \Big|_{|r-na| \rightarrow r_0} \rightarrow 0, \quad \int_{(\infty)} f(r, v, t) dv < \infty.$$

Второе условие является условием нормировки, которое должно выполняться для произвольных  $r$  и  $t$ .

Наложим дополнительное условие на функцию  $\Phi(|\mathbf{v}|)$  и, как следствие, на  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ ; потребуем существования верхней границы спектра скоростей движущихся частиц:

$$|\mathbf{v}| < |\mathbf{v}_{\text{кр}}|, \quad \frac{mv_{\text{кр}}^2}{2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0} e^{-\chi r_0};$$

указанным требованиям можно удовлетворить одновременно, если

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)|_{|r-na| \rightarrow +r_0} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)|_{|r-na| < r_0} \equiv 0.$$

В аппарате статистических функций распределения это позволяет учитывать непроницаемость сфер путем исключения из области интегрирования в пространственных интегралах объема, приходящегося на непроницаемую сферу. Внутри этой сферы устраниются все величины, связанные с движущимися частицами.

В частности, взаимодействия должны содержать обрезывающий параметр  $r_0$ , так что

$$\sigma_f(k_{\perp}) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_{r_0}^{\infty} e^{-\chi s} \frac{\sin k_{\perp} s}{k_{\perp}^2 s} s ds. \quad (\text{VI.71})$$

Подставив выражение для  $\sigma_f(k_{\perp})$  в специальную функцию

$$S(R_{\perp}) = - \int_0^{\infty} k_{\perp}^2 \sigma_f(k_{\perp}) \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(k_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_{\perp} dk_{\perp}, \quad (\text{VI.72})$$

приходим к двойному интегралу

$$S(R_{\perp}) = -4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_{r_0}^{\infty} e^{-\chi s} ds \int_0^{\infty} k_{\perp}^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) \times \\ \times J_0\left(k_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) \sin k_{\perp} s dk_{\perp}, \quad (\text{VI.73})$$

являющемуся функцией расстояния  $R_{\perp}$  и двух параметров,  $r_0$  и  $\langle r_{\perp}^2 \rangle$ .

В излагаемой теории эта функция является основной, она определяет распределение интенсивности внутри пятна на коллекторе от одной подрешетки с номером  $n_z$ . Координаты центров пятен

$$\mathbf{r}_{\perp} = - (m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y) \frac{|z|}{n_z a_z}; \quad m_x, m_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

входящие в выражение аргумента  $R_{\perp}$  функции  $S(R_{\perp})$

$$R_{\perp} = \left| \mathbf{r}_{\perp} + (m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y) \frac{|z|}{n_z a_z} \right| \frac{n_z a_z}{|z|},$$

являются точками пересечения осей кристалла с плоскостью кол-

лктора. При  $r_0 = 0$  ход функции  $S(R_{\perp})$  определен в § 2 этой главы. В центре пятна и его окрестностях  $S(R_{\perp}) < 0$ , что указывает на уменьшение интенсивности вышедших из кристалла частиц по сравнению с интенсивностью диффузионного фона. При  $r_0 = 0$  имеет место явление блокировки в направлении кристаллографических осей.

Возникает вопрос: существуют ли достаточно большие значения параметра  $r_0$ , при которых функция  $S(R_{\perp})$  меняет знак и, следовательно, блокировочная кривая «переворачивается» и определяет увеличение интенсивности над фоном в направлениях кристаллографических осей? В этом случае это указывало бы на переход блокировочных лунок в пятна Венера при достаточном увеличении параметра  $r_0$ . В центре пятна ( $R_{\perp} = 0$ )

$$J_0\left(k_{\perp}R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right)\Big|_{R_{\perp}=0} = 1$$

и внутренний интеграл в полученной новой функции  $S(R_{\perp})$  сводится к специальной функции  $I(\mu)$ :

$$\left(\frac{1}{2}\langle r_{\perp}^2 \rangle\right)^{s/2} \int_0^{\infty} k_{\perp}^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) \sin k_{\perp} s dk_{\perp} = \frac{dI(\mu)}{d\mu}, \quad (\text{VI.74})$$

$$s = \mu \left(\frac{1}{2}\langle r_{\perp}^2 \rangle\right)^{-1/2}, \quad I(\mu) = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos \mu x dx.$$

Асимптотическое поведение функции  $I(\mu)$  при  $\mu \rightarrow 0$  и  $\infty$  имеет следующий вид:

$$I(\mu) \rightarrow \begin{cases} -1/2, & \mu \rightarrow 0, \\ 1/\mu^2, & \mu \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (\text{VI.75})$$

Ее значения приведены в табл. 5, а на рис. 13 изображены кривые функций  $I(\mu)$  и  $I'(\mu)$ . Как видно из рисунка, функция  $I(\mu)$  положительна для всех значений  $\mu > 1,57$ , а ее производная отрицательна для всех  $\mu \geq 3$ .

Значение функции  $S(R_{\perp})$  при  $R_{\perp} = 0$  выражается через интегрирование функции  $I'(\mu)$  с некоторым весом:

$$S(0) = -4\pi Z_1 Z_2 e^2 \left(\frac{2}{\langle r_{\perp}^2 \rangle}\right) \int_{r_0(2/\langle r_{\perp}^2 \rangle)^{1/2}}^{\infty} e^{-V_{01}\mu} I'(\mu) d\mu, \quad (\text{VI.76})$$

$$a = 1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle \kappa^2.$$

Таблица 5  
Значения функции  $I(\mu)$

$\mu$	$I(\mu)$
0	-0,5
1,0	-0,286
1,5708	-0,082
2	+0,043
2,5	+0,121
3,0	+0,142
4,0	+0,105
5,0	+0,059
6,0	+0,032
7,854	+0,017
10	+0,0103

На основании этого вида и отрицательности функции  $I'(\mu)$  при  $\mu \geq 3$  заключаем, что условием положительности функции  $S(0)$  является требование

$$r_0 \geq \frac{3}{\sqrt{2}} \langle r_{\perp}^2 \rangle^{1/2}.$$

При выполнении этого условия получаем следующую формулу для превышения интенсивности пятна над фоном:

$$\rho_f^{(1)}(r, t) = \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \frac{1}{m|z|^2} \frac{a_z}{2\pi} \int_{|r|/t}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi) d\xi \sum_{n_z=1}^{n_a} n_z S(0) > 0. \quad (\text{VI.77})$$

Таким образом: 1) если в силах взаимодействия между частицами пучка и атомами кристалла доминирующими являются

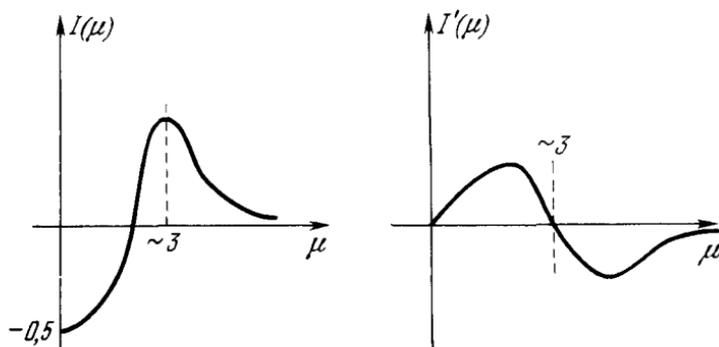


Рис. 13.

силы отталкивания, при наличии непроницаемых сфер вокруг атомов кристалла, и 2) если радиус непроницаемых сфер удовлетворяет полученному выше условию, то имеет место не блокировка, а усиление интенсивности частиц на коллекторе в тех местах, которые приходятся на центры лунок.

Доказательство изменения знака интенсивности проведено только для центра пятна (рис. 14), однако оно остается справедливым и в некоторой окрестности этого центра, окрестности достаточно большого радиуса, чтобы играть роль в эксперименте. В самом деле, для этого необходимо, чтобы в интеграле

$$\int_{r_0}^{\infty} e^{-\kappa s} ds \int_0^{\infty} k_{\perp}^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(k_{\perp} R_{\perp} \frac{z^a z}{|z|}\right) \sin k_{\perp} s dk_{\perp}$$

функцию Бесселя  $J_0(k_{\perp}R_{\perp}n_z a_z/|z|)$  можно было бы аппроксимировать единицей даже в областях, где ее аргумент отличен от нуля. Это возможно, если эффективная ширина другого множителя в подынтегральном выражении — гауссовой функции

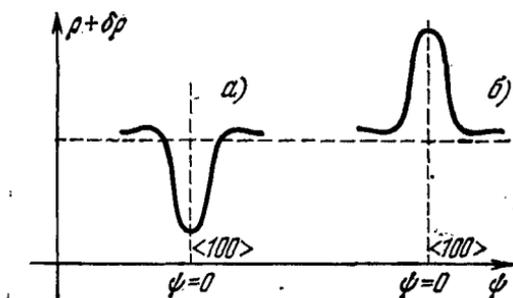


Рис. 14.

$\exp(-1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2)$  — будет находиться внутри первого максимума бesselовой функции.

Таким образом, необходимо одновременное выполнение двух неравенств

$$\left(\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle\right)^{1/2} k_{\perp} > 1, \quad k_{\perp} \delta r_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \lesssim 2,405, \quad (\text{VI.78})$$

что возможно при достаточно малом значении радиуса окрестности вокруг центра пятна  $\delta r_{\perp}$ .

Находим

$$\delta r_{\perp} \lesssim \left(\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle\right)^{1/2} \frac{2,405}{n_z a_z}. \quad (\text{VI.79})$$

Полагая  $(1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle)^{1/2} / a_z \sim 10^{-1}$ ,  $z \sim 10$  см,  $n_z \sim 5$ , получаем

$$\delta r_{\perp} \lesssim 0,5 \text{ см},$$

что является достаточным для того, чтобы играть заметную роль в эксперименте.

Что будет происходить при уменьшении радиуса непроницаемых сфер? Как видно из хода функции  $I'(\mu)$ , значение  $S(R_{\perp})$  будет уменьшаться по модулю, переходя через нуль, и изменит знак при дальнейшем уменьшении  $r_0$ . Поскольку функция  $I'(\mu)$  является непрерывной, то процесс изменения величины  $S(R_{\perp})$  будет происходить непрерывно при уменьшении радиуса  $r_0$ .

Вычислим прямым образом функцию  $S(R_{\perp})$  для случая малого радиуса непроницаемых сфер

$$r_0 \ll 3 \left(\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle\right)^{1/2},$$

что соответствует значительным кинетическим энергиям движущихся частиц в кристалле. В этом случае

$$\sigma_f(k_{\perp})|_{r_0 \rightarrow 0} = \left( 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_{r_0}^{\infty} e^{-\kappa s} \frac{\sin k_{\perp} s}{k_{\perp} s} s ds \right)_{r_0 \rightarrow 0} \rightarrow \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{k^2 + \kappa^2} \quad (\text{VI.80})$$

и в пределе

$$S(R_{\perp})|_{r_0 \rightarrow 0} = -4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp}^2}{k_{\perp}^2 + \kappa^2} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle r_{\perp}^2 \rangle k_{\perp}^2\right) J_0\left(k_{\perp} R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_{\perp} dk_{\perp}. \quad (\text{VI.81})$$

Интеграл в (VI.81) принадлежит к типу интегралов Вебера и сводится к неполным цилиндрическим функциям (см. § 3 настоящей главы):

$$S(R_{\perp})|_{r_0=0} = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 \kappa^2 S(a, X), \quad (\text{VI.82})$$

где

$$X = R_{\perp} \frac{n_z a_z}{|z|} \kappa, \quad a = 1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle \kappa^2.$$

При этом асимптотическое поведение в окрестности и на периферии пятна таково:

$$S(a, X, 0) = \begin{cases} -\frac{1}{2a^2} e^{-X^{2/4a}} & \text{при } X \rightarrow 0, \\ 2e^a K_0(X) & \text{при } X \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (\text{VI.83})$$

Функция  $S(R_{\perp})$  исследована и табулирована в § 2. Она описывает характерную для явлений блокировки ионов «лунку с ореолом».

Результат численного интегрирования функции  $S(a, X, r_0)$  при наличии конечного радиуса непроницаемой сферы

$$S(a, X, r_0) = -\frac{2}{a} \int_{r_0}^{\infty} e^{-\sqrt{a} t} dt \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} J_0\left(y \frac{X}{\sqrt{a}}\right) \sin yt dy \quad (\text{VI.84})$$

представлен в табл. 6 для значений  $r_0^* = r_0 (1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle)^{-1/2}$ , равных 3 и 0, при  $a = 0,5$ .

Численный расчет иллюстрирует полученный выше вывод об изменении знака интенсивности вышедших из кристалла частиц в центре пятен, получающихся на экране.

В итоге теория приводит к заключению, что при непрерывном изменении радиуса  $r_0$  непроницаемых сфер в отталкивательном потенциале, зависящем от кинетической энергии движущихся

Таблица 6

Значения функции  $S(a, X, r_0^*)$ 

$X$	$S(0,5, X, 3)$	$X$	$S(0,5, X, 3)$	$X$	$S(0,5, X, 3)$
0	0,023	0,8	0,007	2,2	-0,042
0,1	0,023	0,9	0	2,4	—
0,2	0,022	1	-0,004	2,6	—
0,3	0,021	1,2	-0,016	2,8	-0,019
0,4	0,019	1,4	-0,028	3	-0,009
0,5	0,016	1,6	—	3,5	—
0,6	0,012	1,8	-0,041	3,8	—
0,7	0,010	2	-0,043	4	—
				4,1	0,017

частиц, пятна Венера переходят в блокировочные лунки при переходе  $r_0$  через критическое значение  $r_0 \sim 3 (1/2 \langle r_{\perp}^2 \rangle)^{1/2}$ .

При этом в обоих случаях полностью сохраняется статистический механизм трансляции частиц через кристалл.

ГЛАВА VII

**ПРИМЕНЕНИЕ  
НЕЛОКАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ  
К РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМУ АНАЛИЗУ  
КРИСТАЛЛОВ**

---

§ 1. Объединение полей — дифракционного для рентгеновского рассеяния и статистического для функций распределения атомов в кристалле

Пусть, как обычно,  $\mathbf{s}_0$  является единичным вектором, направленным по нормали к фронту падающих волн,  $\mathbf{s}$  — к фронту рассеянных волн.

Разность хода волн, излученных атомом, находящимся с некоторой вероятностью в начале координат, и атомом, находящимся в точке  $\mathbf{r}$  с другой (или с той же) вероятностью, есть  $(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r}$ . Разность фаз между ними будет

$$\frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} \equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}, \quad |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} 2 \sin \vartheta. \quad (\text{VII.1})$$

Обозначим амплитуду рассеяния волн от одного атома, на расстоянии  $R$  от кристалла, через  $C$ . В простейшем случае неполяризованного излучения

$$C = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\sqrt{1 + \cos^2 2\vartheta}}{\sqrt{2} R} \Phi_0, \quad (\text{VII.2})$$

где  $2\vartheta$  — угол рассеяния,  $R$  — расстояние точки наблюдения от кристалла,  $\Phi_0$  — сила осциллятора соответствующей спектральной линии.

Пусть, далее,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  — функция распределения, описывающая состояние атомов в кристалле. Плотность вероятности местоположения атомов есть

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (\text{VII.3})$$

Амплитуда рассеянного поля от всего кристалла, имеющего объем  $V$ , будет

$$C \int_V \rho(\mathbf{r}, t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{VII.4})$$

Удобно, для дальнейшего, распространять интегралы по бесконечной области, вводя вспомогательную разрывную функцию  $\sigma(\mathbf{r})$

$$\sigma(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in V, \\ 0, & \mathbf{r} \notin V; \end{cases} \quad (\text{VII.5})$$

тогда амплитуду рассеяния можно выразить так:

$$C \int_{(\infty)} \rho(\mathbf{r}, t) \sigma(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{VII.6})$$

Интенсивность излучения определяется через квадрат модуля амплитуды рассеяния волн:

$$I(\mathbf{k}, t) = C^2 \iint_{(\infty)} \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r}') \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (\text{VII.7})$$

или, вводя новые переменные интегрирования

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r} = \mathbf{X}, \quad d\mathbf{r}' = d\mathbf{X},$$

$$I(\mathbf{k}, t) = C^2 \iint_{(\infty)} \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r} + \mathbf{X}) \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{X}) d\mathbf{r} d\mathbf{X}, \quad (\text{VII.8})$$

$$C^2 = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2R^2} \Phi_0^2, \quad \rho(\mathbf{r}) = \int_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}.$$

Присоединяя к этим формулам основное уравнение для функции распределения (I.7), мы учитываем наряду с функцией распределения, описывающей положение и скорости атомов в кристалле, дифракционное поле, характеризующее интенсивность рассеяния в точке наблюдения, далеко отстоящей от кристалла. В объединении этих полей не учитывается обратное влияние излучения на функцию распределения атомов в кристалле.

Объединенные уравнения представляют замкнутый аппарат для теоретического анализа рентгенограмм.

Перейдем к рассмотрению двух, взаимно исключаящих друг друга, следствий.

1. Объединенные уравнения содержат в себе классическую теорию дифракции рентгеновских лучей кристаллами.

В первой главе мы узнали, что при известных условиях функция распределения как одно из решений исходного уравнения описывает состояние частиц, характеризующееся локализацией в пространстве координат, скоростей и времени:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_n(t)). \quad (\text{VII.9})$$

Центры тяжести дельта-функций находятся в точках

$$\mathbf{r}_n(t) = \mathbf{r}_n(0) + \mathbf{u}_n(t),$$

$$\mathbf{v}_n(t) = \frac{d\mathbf{r}_n(t)}{dt} = \dot{\mathbf{u}}_n(t),$$

где векторы  $\mathbf{r}_n(0)$  проведены к узлам решетки:

$$\mathbf{r}_n(0) = n\mathbf{d}, \quad n\mathbf{d} = n_1\mathbf{d}_1 + n_2\mathbf{d}_2 + n_3\mathbf{d}_3,$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3),$$

и  $u_n(t)$  обозначает величины смещения атомов относительно узлов. В гармоническом приближении из основного уравнения получаются механические уравнения движения

$$m\ddot{u}_{m\alpha} = \sum_{m', \beta} U_{\alpha\beta}(m, m') u_{m'\beta},$$

где упругие коэффициенты представляют собой вторые производные потенциальной энергии взаимодействия частиц

$$U_{\alpha\beta}(m, m') = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_{m\alpha} \partial u_{m'\beta}} \right|_0,$$

индекс 0 означает, что они берутся в несмещенных положениях. Для плотности вероятности местоположения атомов имеем

$$\rho(r, t) = \sum_n \delta\{r - [r_n(0) + u_n(t)]\}.$$

Подставляя это выражение в формулу для интенсивности, получаем информацию о рассеянии в локальной модели кристалла:

$$I(k, t) = C^2 \sum_n \sum_{n'} \exp\{-ik[r_n(0) - r'_{n'}(0)] - ik[u_n(t) - u_{n'}(t)]\}. \quad (\text{VII.10})$$

В общепринятом подходе требуется усреднение (VII.10) по времени для получения сведений о влиянии на рассеяние теплового движения атомов кристалла. Доказывается, что в известном приближении [34]

$$\begin{aligned} \exp\{\overline{-ik[u_n(t) - u_{n'}(t)]^t}\} &= \exp\left(-\frac{1}{2} \overline{p_{nn'}^2}^t\right), \\ \overline{p_{nn'}^2}^t &= \overline{\{k[u_n(t) - u_{n'}(t)]\}^2}^t = 2M, \quad M = \frac{8\pi^2 u^2 t}{\lambda^2} \sin^2 \vartheta. \end{aligned}$$

При этом

$$I^t \sim e^{-2M}. \quad (\text{VII.11})$$

Фактор  $M$  (фактор Дебая — Валлера) определяет уменьшение интенсивного дифракционного рассеяния в зависимости от средней амплитуды колебаний атомов около узлов решетки, длины волны  $\lambda$  и угла рассеяния  $\vartheta$ . При этом максимумы двойной суммы возникают при наличии определенной связи между вектором рассеяния  $k = \frac{2\pi}{\lambda} (s - s_0)$  и вектором обратной решетки

$$la = \left( l_1 \frac{2\pi}{d_1}, l_2 \frac{2\pi}{d_2}, l_3 \frac{2\pi}{d_3} \right), \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

В точках дифракционных максимумов соблюдается условие Брегга — Вульфа:  $k = la$ .

Классическая теория правильно передала основные черты явлений дифракции рентгеновских лучей, а именно

1) дала объяснение положения главных дифракционных максимумов;

2) объяснила основную особенность влияния температуры на главные максимумы: температура уменьшает амплитуду главных максимумов, не изменяя их положения и их ширину;

3) привела к объяснению наличия слабых диффузных максимумов, исходя из механической природы теплового движения.

Однако с точки зрения нелокально-статистической теории переход к локализации в условиях кристалла практически невозможен, так как нельзя удовлетворить основным условиям локализации частиц, которые рассматриваются в первой главе.

Наличие общей природы изменения как главных максимумов в зависимости от температуры, так и диффузных, обусловленных доплер-эффектом на упругих волнах, трудно считать экспериментально строго доказанным, несмотря на то, что каждый из эффектов в отдельности и существует.

Эксперимент приводит к наличию так называемых «штабов» при изображении картины рассеяния в пространстве обратной решетки, после облучения некоторых кристаллов нейтронами. Появление «штабов» не получило последовательного объяснения с классических позиций.

Рассмотрим дифракционное поле с точки зрения нелокально-статистической теории.

В условиях стационарного состояния кристалла ( $\partial f/\partial t = 0$ ) и независимости распределений частиц по координатам и скоростям ( $f = \rho(\mathbf{r})w(v^2)$ ), в случае наличия трансляционной симметрии ( $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + n_1d_1 + n_2d_2 + n_3d_3)$ ), решение для вероятности местоположения центров атомов выражается так:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_l a_l \exp(i\mathbf{l}\mathbf{r}),$$

$$a_l = \frac{1}{d_1d_2d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 \exp\left(-\frac{2\pi^2 \langle x_\alpha^2 \rangle l_\alpha^2}{d_\alpha^2}\right),$$

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{Q}{\partial^2_{x_\alpha} K|_0} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1}, \quad K(\mathbf{r}) = \sum_l' K[\mathbf{r} - (\mathbf{l}_1d_1 + \mathbf{l}_2d_2 + \mathbf{l}_3d_3)]$$

(см. гл. II).

Строгая периодическая структура кристаллов не нарушается наличием температуры, изменяются только амплитуды гармоник ряда Фурье

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_l a_l(\theta) \exp(i\mathbf{l}\mathbf{r}),$$

но не кратные гармоники не появляются.

В этом состоит одно из существенных отличий нелокальной теории кристалла от классической теории.

Непрерывность местоположения атомов в кристалле не требует временного интервала, обеспечивающего усреднение, — оно обусловлено первичностью понятий непрерывных функций распределения, которое не связано с каким-либо усреднением по времени, пространству или начальным условиям. В этом пункте также существует важное отличие от классической теории.

В связи с имеющейся разницей локального и нелокального способов описания поведения атомов в кристалле возникают следующие задачи:

1. Приводит ли нелокальное понимание механизма теплового движения частиц к объяснению уменьшения главных дифракционных максимумов по закону (VII.11), который получен Дебаем — Валлером в рамках общепринятой теории?

2. К какому результату приводит учет акустических «шумов» в нелокальной теории? Акустические колебания в этой теории приводят к пространственной модуляции акустических волн, не имеющей места в теории механических колебаний (см. главу IV);

$$f = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \varphi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad |\varphi^{(1)}| \ll f_0,$$

$$\varphi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = e^{pt - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_l b_l(\mathbf{v}, p) e^{i\mathbf{l}\mathbf{a}\mathbf{r}},$$

где связь  $p = i\omega - \gamma$  с  $|\mathbf{k}|$  описывается дисперсионным уравнением

$$\varepsilon(|\mathbf{k}|, p) = 0.$$

Объясняет ли учет «шумов» подобного вида особенности диффузных максимумов и их анизотропию?

3. Одним из характерных отличий нелокальной модели кристалла от классической динамической теории решетки является существование решеточно-нитевидных и решеточно-пластинчатых структур — равноправных решений в сравнении с троякопериодическими решениями статистических уравнений. Эти структуры являются состояниями возбуждения кристалла. Имеют ли они отношение к явлению «штабов», получающихся при возбуждении кристаллов быстрыми заряженными частицами?

Рассмотрим возникающие вопросы.

## § 2. Условия Брегга — Вульфа, фактор Дебая — Валлера и диффузное рассеяние в нелокальной модели кристалла

Формулу для дифракционного поля (VII.8) при учете периодического распределения в пространстве плотности вероятности местоположения частиц

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_l a_l(\theta) e^{i\mathbf{l}\mathbf{a}\mathbf{r}}$$

можно записать так:

$$I(\mathbf{k}) = C^2 \sum_{l, l'} a_l a_{l'} \int_{(\infty)} e^{i(l'a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{X}} \left[ \int_{(\infty)} e^{i(la + l'a) \cdot \mathbf{r}} \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) d\mathbf{r} \right] d\mathbf{X}. \quad (\text{VII.12})$$

Введем вспомогательную функцию [34]

$$\Omega(\mathbf{X}) = \int_{(\infty)} \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) d\mathbf{r}, \quad (\text{VII.13})$$

где

$$\sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{X} \in V, \\ 0, & \text{если } \mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{X} \notin V. \end{cases}$$

Функция  $\Omega(\mathbf{X})$  отлична от нуля только в общих точках сдвинутых объемов всего кристалла на вектор  $\mathbf{X}$  и обладает свойствами

$$\Omega(\mathbf{X}) = \begin{cases} V, & |\mathbf{X}| \rightarrow 0, \\ 0, & |\mathbf{X}| > |\mathbf{X}_{\max}|. \end{cases} \quad (\text{VII.14})$$

Интенсивность рассеяния можно записать в виде

$$I(\mathbf{k}) = C^2 \sum_{l, l'} a_l a_{l'} \int_{(\infty)} e^{i(l'a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{X}} d\mathbf{X} \int_{\Omega(\mathbf{X})} e^{i(la + l'a) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (\text{VII.15})$$

где

$$a_l = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right) \prod_{\alpha=1}^3 \exp\left(-\frac{2\pi^2 \langle x_\alpha^2 \rangle l_\alpha^2}{d_\alpha^2}\right). \quad (\text{VII.16})$$

Формула (VII.15) для интенсивности получена без усреднения по времени, поэтому она указывает на строгую когерентность дифракционного поля даже при  $\theta \neq 0$ , чего нет в классической теории.

Формула включает информацию о параметрах кристалла, содержит границы кристалла через посредство функции  $\Omega(\mathbf{X})$  и зависит от температуры.

Воспользуемся  $\delta$ -образным характером интеграла

$$\int_{\Omega(\mathbf{X})} e^{i(la + l'a) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

при малых значениях сдвига  $\mathbf{X}$  ( $\Omega(\mathbf{X}) \rightarrow V$ ):

$$\int_{\Omega(\mathbf{X})} e^{i(la + l'a) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \approx \Omega(\mathbf{X}) \delta_{la + l'a}. \quad (\text{VII.17})$$

Используя это выражение, имеем

$$\sum_l a_l \int_{\Omega(\mathbf{X})} e^{i(la + l'a) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \approx \sum_l a_l \Omega(\mathbf{X}) \delta_{la + l'a} = a_{-l} \Omega(\mathbf{X}). \quad (\text{VII.18})$$

Формулу для интенсивности  $I(\mathbf{k})$  можно записать так:

$$\begin{aligned} I(\mathbf{k}) &= C^2 \sum_{\nu} a_{\nu} a_{\nu} \int_{(\infty)} e^{i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{X}} \Omega(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = \\ &= C^2 \sum_{\nu} |a_{\nu}|^2 \int_{(\infty)} \sigma(\mathbf{r}) e^{-i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \int_{(\infty)} \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) e^{i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{X})} d\mathbf{X} = \\ &= C^2 \sum_{\nu} |a_{\nu}|^2 \left| \int_{(\infty)} \sigma(\mathbf{r}) e^{i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2. \quad (\text{VII.19}) \end{aligned}$$

Рассмотрим кристалл в виде параллелепипеда:

$$V = N_1 d_1 \cdot N_2 d_2 \cdot N_3 d_3.$$

В этом случае

$$\int_{(\infty)} \sigma(\mathbf{r}) e^{i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int_V e^{i(\nu a + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Выражение для дифракционного поля принимает простейшую форму:

$$I(\mathbf{k}) = C^2 V^2 \sum_{\nu} |a_{\nu}|^2 \prod_{\alpha=1}^3 \frac{\sin^2[(l_{\alpha} a_{\alpha} + k_{\alpha}) N_{\alpha} d_{\alpha} / 2]}{[(k_{\alpha} + l_{\alpha} a_{\alpha}) N_{\alpha} d_{\alpha} / 2]^2}. \quad (\text{VII.20})$$

В качестве следствий этой формулы получаем:

1. *Выполнение условий Брегга — Вульфа для положения максимумов интенсивности  $I(\mathbf{k})$ .* В точках максимумов

$$\max I(\mathbf{k}) = C^2 V^2 \sum_{\nu} |a_{\nu}|^2 \delta_{l a + \mathbf{k}}$$

имеем  $\mathbf{k} = -l a$ , что и является указанным условием. При этом ширина дифракционных максимумов всецело определяется размерами кристалла:

$$\Delta k_{\alpha} \frac{N_{\alpha} d_{\alpha}}{2} \geq \pi, \quad \Delta k_{\alpha} \geq \frac{2\pi}{d_{\alpha}} \frac{1}{N_{\alpha}} \ll \frac{2\pi}{d_{\alpha}}$$

в случае  $N_{\alpha} \gg 1$ .

2. *Фактор Дебая — Валлера в нелокальной теории.* Интенсивность в центре дифракционных максимумов есть квадрат амплитуды разложения в ряд Фурье плотности вероятности местоположения центров атомов в кристалле и дается формулой

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} a_{\nu} e^{i \nu a \cdot \mathbf{r}},$$

где

$$|a_{\nu}|^2 = \left[ \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} \right]^2 \exp \left( - \sum_{\alpha=1}^3 \frac{4\pi^2 l_{\alpha}^2}{d_{\alpha}^2} \langle x_{\alpha}^2 \rangle \right).$$

Воспользовавшись условием Брегга — Вульфа, имеем

$$\sum_{\alpha} \frac{4\pi^2 l_{\alpha}}{d_{\alpha}^2} \langle x_{\alpha}^2 \rangle = \overline{\langle x_{\alpha}^2 \rangle} k^2 = \left( \frac{2\pi}{\lambda} 2 \sin \vartheta \right)^2 \overline{\langle x_{\alpha}^2 \rangle};$$

таким образом,

$$|a_l|^2 = \left[ \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho d\mathbf{r} \right)^{-1} \right]^2 \exp \left( - \frac{16\pi^2 \overline{\langle x_{\alpha}^2 \rangle}}{\lambda^2} \sin^2 \vartheta \right), \quad (\text{VII.21})$$

где показатель степени точно соответствует фактору Дебая — Валлера в классической теории.

Итак, два различных представления о механизме температурного движения атомов в кристалле приводят к одному и тому же результату. Однако эти представления требуют разных исходных предположений и различия точности измерения во времени рентгеновского излучения, поэтому в принципе два описания должны быть различимы с точки зрения эксперимента.

Классическое представление получается после усреднения по времени, нелокальное же правомерно для сколь угодно малых времен. Исследование коротких рентгеновских импульсов (меньших периода колебаний атомов) могло бы, возможно, привести к правильности только одной из теорий.

Заметим, что влияние температуры только на амплитуду дифракционных пятен, а не на их ширину, находит в нелокальной теории более непосредственное объяснение, чем в классической теории.

Температура в нелокальной теории не изменяет строгой периодичности кристалла, а изменяет только величины амплитуд в фурье-разложении периодической функции для  $\rho(\mathbf{r})$ .

Перейдем к рассмотрению влияния «шумов» на дифракционное рассеяние рентгеновских лучей в нелокальной модели кристалла.

«Шумы» акустического происхождения обусловлены суперпозицией продольных волн вида (см. гл. IV, § 4)

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_l b_l(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i l \mathbf{r}}.$$

Характерный интеграл в формуле интенсивности (VII.8) имеет вид

$$\int_{(\infty)} (\rho(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t)) (\rho(\mathbf{r} + \mathbf{X}, t) + \delta\rho(\mathbf{r} + \mathbf{X}, t)) \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{X}) \times \\ \times e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{r}.$$

Используя выражение

$$\rho(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_l a_l e^{i l \mathbf{r}} + \sum_{l', \tilde{\mathbf{k}}} b_{l'}(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i(l' a - \tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{r}},$$

рассматривая акустические волны в адиабатическом приближении и ограничиваясь членами первого порядка, получаем следующую добавку к интенсивности, обусловленную амплитудами  $b_l(\tilde{k})$ :

$$\delta I(k) = C^2 \sum_{\tilde{k}} \sum_l \sum_{l'} \left[ a_l b_{l'}(\tilde{k}) \int_{(\infty)} e^{i(l'a - \tilde{k} + k)x} dX \int_{\Omega(X)} e^{i(l'a + l'a - \tilde{k})r} r dr + \right. \\ \left. + a_{l'} b_l(\tilde{k}) \int_{(\infty)} e^{i(l'a + k)x} dX \int_{\Omega(X)} e^{i(l'a + l'a - \tilde{k})r} r dr \right]. \quad (\text{VII.22})$$

Выявим волновые числа в спектре акустических волн, имеющие максимальное влияние на интенсивность рассеяния  $\delta I(k)$ . Условием этого будет требование

$$l'a + l'a - \tilde{k} = 0.$$

Заменяя для  $\delta I(k)$  сумму волновых векторов новой суммой в первом члене

$$l'a - \tilde{k} + k \rightarrow -l'a + k,$$

во втором члене

$$l'a + k = -l'a + k + \tilde{k}$$

и идя прежним путем, получаем

max  $\delta I(k) =$

$$= C^2 V^2 \sum_{\tilde{k}} \sum_l \left\{ a_l b_{l'}(\tilde{k}) \prod_{\alpha=1}^3 \frac{\sin^2[(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]}{[(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]^2} + \right. \\ \left. + a_{l'} b_l(\tilde{k}) \prod_{\alpha=1}^3 \frac{\sin^2[(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha + \tilde{k}_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]}{[(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha + \tilde{k}_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]^2} \right\} \quad (\text{VII.23}) \\ (l'a = -l'a + \tilde{k}).$$

В этом выражении первый член имеет максимумы в точках, удовлетворяющих условию Брегга для недеформированного кристалла:

$$k = l'a.$$

Второй член имеет максимумы при новых значениях волнового числа

$$k = l'a - \tilde{k}.$$

Приходим к следующим результатам:

1. Учет «шумов» в нелокальной модели кристалла приводит к сплошному ореолу вокруг основных дифракционных пятен,

соответствующих условию Брегга, так как волновое число упругих волн  $|\tilde{k}|$  практически пробегает непрерывный спектр значений.

Существование диффузного ореола получается более последовательно и при меньшем числе ограничивающих допущений, чем в классической теории.

2. Радиус диффузного ореола в пространстве волновых чисел меньше периода обратной решетки:

$$\max \Delta |k - la| = \max |\tilde{k}| < 2\pi/d$$

для случая «шумов», в спектре которых слабо возбуждены гиперзвуковые волны, и превышает период обратной решетки для обратного случая.

3. Диффузный ореол зависит от длины волны рентгеновских лучей и температуры, но более сложным образом, чем это следовало бы при переносе фактора Дебая — Валлера на диффузные максимумы, так как коэффициенты  $a_l$  и  $b_l$  в максимумах интенсивности зависят по-разному от волнового вектора  $k$ :

$$a_{la} = a_{-la+\tilde{k}} = a_{-k}, \quad b_{la} = b_{k+\tilde{k}}.$$

4. Диффузный ореол вокруг основных пятен в большей мере анизотропичен, чем брегговские максимумы, вследствие дополнительной зависимости коэффициентов  $b_l$  от направления звуковых волн и зависимости дисперсии от анизотропии кристалла.

В классической теории кристалла анизотропия при абсолютном нуле температуры отсутствует, при  $\theta \neq 0$  имеет одну природу как для главных, так и для диффузных максимумов.

В нелокальной теории анизотропия имеется для главных максимумов и дополнительная — для диффузных.

### § 3. Теоремы о «штабах»

Наиболее отчетливые экспериментальные результаты о «штабах» получены на кристаллах LiF, подверженных облучению нейтронами (с интенсивностью  $1,5 \cdot 10^{17} - 10^{19}$  нейтрон/см<sup>2</sup>).

В этих кристаллах содержится приблизительно 7,5% атомов Li<sup>6</sup>, ядра которых участвуют в ядерной реакции



Результаты дифракции рентгеновских лучей после облучения нейтронами этих кристаллов приводят к следующим выводам:

1. После перевода дифракционной картины в пространство обратной решетки, кроме главных дифракционных пятен,

расположенных в точках

$$(l_1 a_1); (l_2 a_2); (l_3 a_3);$$

$$(a_1, a_2, a_3) = \left( \frac{2\pi}{d_1}, \frac{2\pi}{d_2}, \frac{2\pi}{d_3} \right); \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

появляются перемычки в виде прямолинейных штрихов, расположенных в одном направлении и проходящих через несколько главных пятен. Подобные перемычки называются «штабов». Если  $I(\mathbf{k})$  обозначает интенсивность внутри «штабов», то в идеальном случае узких, строго прямолинейных «штабов», с одинаковой интенсивностью вдоль прямых, можно считать, что

$$\frac{\partial I(\mathbf{k})}{\partial k_2} = \frac{\partial I(\mathbf{k})}{\partial k_3} = 0, \quad I(k_1) \sim \delta(k_1 - l_1 a_1). \quad (\text{VII.24})$$

Замечено, что повышение температуры кристалла способствует увеличению протяженности штабов.

2. Зафиксированы не только штрихи, но и плоскостные следы в обратной решетке, составляющие одномерную периодическую структуру с периодом между плоскостями, равным  $2\pi/d_1$ , если плоскости направлены вдоль осей  $l_2 a_2, l_3 a_3$ . Можно считать, что в этом случае

$$\partial I(\mathbf{k})/\partial k_3 = 0, \quad I(\mathbf{k}_\perp) \sim \delta(k_1 - a_1 l_1) \delta(k_2 - a_2 l_2). \quad (\text{VII.25})$$

**Т е о р е м а 1.** Специальная форма трехмерных кристаллитов (дискообразная или игольчатая) не может быть причиной образования «штабов».

Неоднократно высказывалось предположение, что под влиянием облучения в монокристаллах возникают блоки неоднородностей в виде дисков или игольчатых кристаллических уплотнений (или разряжений), дифракция на которых и приводит к появлению протяженных рефлексов типа «штабов».

Предположим, что появившийся кристаллит имеет форму параллелепипеда, который может быть сжат или вытянут, смотря по значению числа кристаллических периодов, в разных направлениях.

Тогда формула в нелокальной теории для интенсивности рассеяния имеет вид

$$I(\mathbf{k}) = C^2 V^2 \sum_l |a_l|^2 \prod_{\alpha=1}^3 \frac{\sin^2 [(l_\alpha a_\alpha - k_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]}{[(l_\alpha a_\alpha - k_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]^2},$$

$$V = N_1 d_1 \cdot N_2 d_2 \cdot N_3 d_3, \quad (\text{VII.26})$$

$$a_l = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \left( \int_{(\Omega)} \rho \, dr \right) \prod_{\alpha=1}^3 \exp \left( - \frac{2\pi^2 \langle x_\alpha^2 \rangle l_\alpha^2}{d_\alpha^2} \right), \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0),$$

$$l_\alpha a_\alpha = \frac{2\pi}{d_\alpha} l_\alpha, \quad l_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Дифракционные максимумы функции  $I(\mathbf{k})$  имеют место при выполнении условия Брегга — Вульфа  $k_\alpha = l_\alpha a_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ .

Выясним, в каком случае могли бы появиться «штабы» двух измерений в виде штрихов, соединяющих дифракционные пятна в пространстве обратной решетки. На штрихах должно соблюдаться условие

$$\partial I(\mathbf{k})/\partial k_3 = 0, \quad I(\mathbf{k}) \neq 0,$$

если штрихи параллельны оси  $k_3$ .

Из формулы для  $I(\mathbf{k})$  видно, что для этого необходимо

$$(N_3 d_3)^2 \frac{\sin^2 [(k_3 + l_3 a_3) N_3 d_3 / 2]}{[(k_3 + l_3 a_3) N_3 d_3 / 2]^2} = \text{const} \neq 0$$

при произвольных значениях  $k_3$ , но это невозможно ни при каких значениях параметра  $N_3$ , включая предельное значение  $N_3 \rightarrow \infty$  и  $N_3 \rightarrow 0$ .

**Т е о р е м а 2.** Акустические шумы в трехмерном кристалле могут быть причиной образования «штабов», однако при этом требуются исключительные условия.

Рассмотрим рассеяние, обусловленное акустическими «шумами», типа

$$\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\omega t - i\tilde{\mathbf{k}}r} \sum_l b_l(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i\mathbf{l}r}$$

и именно ту часть в интенсивности рентгеновского рассеяния, которая приводит к диффузным максимумам. Обозначим эту часть через  $\delta_2 I(\mathbf{k})$ :

$$\delta_2 I(\mathbf{k}) = C^2 V^2 \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, l} a_{\mathbf{k}-l} b_l(\tilde{\mathbf{k}}) \prod_{\alpha=1}^3 \frac{\sin^2 [(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha - \tilde{k}_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]}{[(k_\alpha - l_\alpha a_\alpha - \tilde{k}_\alpha) N_\alpha d_\alpha / 2]^2}. \quad (\text{VII.27})$$

Для существования «штабов» двух измерений необходимо

$$\left. \frac{\partial \delta_2 I(\mathbf{k})}{\partial k_3} \right|_{\text{любые } k_3} = 0 \quad \text{при} \quad \delta_2 I(\mathbf{k}) \neq 0,$$

что требует одновременного соблюдения двух условий:

$$N_3 d_3 \left. \frac{\partial}{\partial k_3} \frac{\sin^2 [(k_3 - l_3 a_3 - \tilde{k}_3) N_3 d_3 / 2]}{[(k_3 - l_3 a_3 - \tilde{k}_3) N_3 d_3 / 2]^2} \right|_{\text{любые } k_3} = 0, \quad (\text{VII.28})$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial k_3} [a_{\mathbf{k}-l} b_l(\tilde{\mathbf{k}})] \right|_{\text{любые } k_3} = 0.$$

Первое требование выполнимо, если в акустическом спектре найдется гармоника, волновой вектор которой удовлетворяет условию

$$k_3 + l_3 a_3 - \tilde{k}_3 = 0$$

при произвольном значении  $k_3$ . Это условие требует существования гиперзвуковых частот в спектре шумов. Если оно выполняется, то в формуле для интенсивности рассеянного излучения появляются резонансные члены, которыми можно было бы объяснить появление «штабов», однако при соблюдении условий:

1) амплитуды гиперзвуковых частот должны быть того же порядка, как и звуковых частот;

2) требуется постоянство амплитуд для всего диапазона гиперзвуковых частот.

Рассмотрим сначала второе условие. Ввиду независимости амплитуд  $a_l$  и  $b_l$  оно представимо в виде

$$\frac{\partial}{\partial k_3} a_{k_3 - l_3 a_3} = -4\pi^2 (k_3 - l_3 a_3) \langle x_3^2 \rangle e^{-2\pi (k_3 - l_3 a_3)^2 \langle x_3^2 \rangle} \Big|_{\text{любые } k_3} = 0, \quad (\text{VII.29})$$

$$\partial b_l(\tilde{k}) / \partial k_3 = 0, \quad k_3 + l_3 a_3 - \tilde{k}_3 = 0.$$

Условие на амплитуды недеформированного кристалла выполнимо только асимптотически — при температуре абсолютного нуля:

$$\langle x_3^2 \rangle \rightarrow 0.$$

**Т е о р е м а 3.** Дифракция на возбужденных состояниях кристалла в виде нитевидных и пластинчатых структур

1) приводит к появлению новых «точечных» рефлексов в пространстве обратной решетки.

2) дает естественное объяснение «штабов» при учете шумов в виде поверхностных волн в нитевидных и пластинчатых структурах.

Распределение плотности вероятности местоположения центров атомов в возбужденных состояниях кристалла определяется формулами

$$\bar{\rho}(r_{\perp}), \bar{\rho}(x) = \sum_{l_{\perp}} a_{l_{\perp}} e^{il_{\perp} ar_{\perp}}, \quad \sum_l a_l e^{ilax},$$

при этом периоды решеток для трех состояний кристалла и энергия связи, рассчитанная на один атом, различны:

$$(d : \bar{d} : \bar{\bar{d}}) = (1,066 : 1,025 : 0,986),$$

$$(\varepsilon : \bar{\varepsilon} : \bar{\bar{\varepsilon}}) = (-2,84 : -2,71 : -1,89)$$

(см. II и III главы).

Возбужденные структуры характеризуются, кроме того, более сильной анизотропией шумов в сравнении с трехмерным кристаллом. Природа волн, изменяющих вероятности местоположения атомов в двух крайних случаях распространения — перпендику-

лярно структурам и вдоль структур, — различна. В первом случае плотность вероятности описывается модулированными (объемными) продольными волнами

$$\delta\rho(\mathbf{r}_\perp, t) = e^{i\omega t - i\tilde{\mathbf{k}}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} \sum_{\mathbf{l}_\perp} b_{\mathbf{l}_\perp}(\tilde{\mathbf{k}}_\perp) e^{i\mathbf{l}_\perp \cdot \mathbf{a} \mathbf{r}_\perp}$$

с законом дисперсии  $\varepsilon(\omega, \tilde{\mathbf{k}}) = 0$ , полученным в главе IV.

При распространении возмущений вдоль возбужденных структур возникают поверхностные волны (симметричные и антисимметричные).

О дисперсионном уравнении поверхностных волн в нитевидных структурах информацию можно получить, исходя из уравнения для моментов функции распределения:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu}\right) u_\lambda = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \mathcal{P}_{\lambda\mu} - \frac{1}{m} \nabla_{r_\mu} U(\mathbf{r}, t), \quad (\text{VII.30})$$

$$\mathcal{P}_{\lambda\mu} = \int_{(\infty)} c_\lambda c_\mu f d\mathbf{v}, \quad \mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{u},$$

$$U(\mathbf{r}, t) = \int K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}.$$

В равновесную конфигурацию, характеризуемую уравнениями

$$u_\lambda \equiv 0, \quad \mathcal{P}_{\lambda\mu}^0 = \rho_0 \delta_{\lambda\mu},$$

$$\rho_0(\mathbf{r}) = C \exp\left[-\frac{1}{\theta} \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\right],$$

введем вектор смещения среды  $\xi$ , полагая

$$\xi(\mathbf{r}, t) = \xi(\mathbf{r}) e^{i\omega t}, \quad \mathbf{u} = \frac{\partial \xi}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \xi \sim \frac{\partial \xi}{\partial t}. \quad (\text{VII.31})$$

Это возмущение вызовет изменение в плотности, тензоре натяжений и молекулярном потенциале:

$$\rho = \rho_0(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathcal{P}_{\lambda\mu} = \mathcal{P}_{\lambda\mu}^0(\mathbf{r}) + \delta\mathcal{P}_{\lambda\mu}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{VII.32})$$

$$U = U_0(\mathbf{r}) + \delta U(\mathbf{r}, t).$$

Умножая исходное уравнение для моментов на  $\xi_\lambda$  и интегрируя по всему объему рассматриваемого образования, получим

$$-\frac{1}{2} \omega^2 m \int_V \rho \xi^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_V \xi_\lambda \left[ \frac{\partial}{\partial x_\mu} \delta\mathcal{P}_{\lambda\mu} - m \delta\rho \frac{\partial U}{\partial x_\lambda} + m\rho \frac{\partial \delta U}{\partial x_\lambda} \right] d\mathbf{r}. \quad (\text{VII.33})$$

Можно показать, что правая часть выражается через изменение потенциальной энергии системы, так что дисперсионное уравнение

для поверхностных колебаний приобретает простой вид [35, 36]:

$$\omega^2 = \frac{\delta W}{m \int_V \rho \xi^2 dr}. \quad (\text{VII.34})$$

Потенциальную энергию поверхностных волн подсчитаем аналогично тому, как это сделано в главе III, вводя для малых расстояний внутри сплошных нитей экранированный потенциал сил отталкивания. Тогда

$$\delta W = \frac{1}{2} \gamma_n R^2 \xi_0^2 \tilde{\rho}_0 [\partial_z^2 \tilde{K} + 4\pi G \tilde{\rho}_0 I_n (\sqrt{\kappa^2 + \tilde{k}_3^2} R) K_n (\sqrt{\kappa^2 + \tilde{k}_3^2} R)], \quad (\text{VIII.35})$$

где  $R$  — эффективный радиус нитей,  $\xi_0$  — амплитуда поверхностных волн,  $\tilde{k}_3$  — волновое число поверхностных волн,  $\tilde{\rho}_0$  — средняя плотность структур до деформации,  $\kappa^{-1}$  — радиус экранированного потенциала,  $\tilde{K}$  — глубина потенциальной ямы, в которой находится рассматриваемая нить,

$$\gamma_n = \begin{cases} \pi/2, & \text{если } n \neq 0, \\ \pi, & \text{если } n = 0, \end{cases}$$

$G$  — амплитуда экранированного потенциала. Существование шумов с непрерывным спектром частот обеспечивается дисперсионным уравнением, так как для произвольных  $k_3$  и  $n$   $\delta W > 0$ .

Рассмотрим сначала интенсивность дифракционного поля от нитевидных структур без наличия шумов. Если длина нитей равна  $L_3$ , то

$$I(\mathbf{k}) = C^2 V^2 \sum_{\perp} |a_{\perp}|^2 \prod_{\alpha=1}^2 \frac{\sin^2 [(l_{\alpha} a_{\perp \alpha} - k_{\perp \alpha}) N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha} / 2]}{[(l_{\alpha} a_{\perp \alpha} - k_{\perp \alpha}) N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha} / 2]^2} \left[ \frac{\sin^2 (k_3 L_3 / 2)}{(k_3 L_3 / 2)^2} \right], \quad (\text{VII.36})$$

$$V = N_1 \bar{d}_1 \cdot N_2 \bar{d}_2 \cdot L_3.$$

Замечаем следующее: 1) ширина рефлексов в направлении оси  $l_3 a_3$  весьма мала, так как

$$\Delta k_3 \sim \frac{2\pi}{L_3} \ll \frac{2\pi}{\bar{d}_3};$$

2) возникают новые «точечные» рефлексы, периодически расположенные в плоскости  $(l_1 a_1, l_2 a_2)$  пространства обратной решетки с расстояниями между ними, равными  $2\pi / \bar{d}_{\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2$ ), где  $\bar{d}_{\alpha}$  — периоды решеточно-нитевидной структуры. Эти периоды меньше периодов трехмерного кристалла, поэтому появляющиеся рефлексы могут быть объектом опытного обнаружения.

Констатируем, однако, что само наличие сплошных нитевидных (и пластинчатых) структур не приводит к протяженным рефлексам, которые можно было бы отождествить со «штабами».

Имея в виду последний вывод, перейдем к выяснению влияния «шумов» в возбужденных структурах на рентгеновское рассеяние.

Рассмотрим наиболее типичные случаи «шумов» в нитевидных структурах: звуковые волны, распространяющиеся нормально к нитям, и поверхностные волны вдоль нитей. Имеем

$$\rho(r) + \delta\rho(r) = \sum_{l_{\perp}} a_{l_{\perp}} e^{i(la)_{\perp} r_{\perp}} + \sum_{\tilde{k}_3} e^{-i\tilde{k}_3 z} \sum_{n_{\perp}} b_{n_{\perp}}(\tilde{k}_3) e^{i(na)_{\perp} r_{\perp}} + \\ + \sum_{\tilde{k}_{\perp}} e^{-i\tilde{k}_{\perp} r_{\perp}} \sum_{m_{\perp}} b_{m_{\perp}}(\tilde{k}_{\perp}) e^{i(ma)_{\perp} r_{\perp}}, \quad (\text{VII.37})$$

где  $b_{n_{\perp}}(\tilde{k}_3)$  и  $b_{m_{\perp}}(\tilde{k}_{\perp})$  — амплитуды поверхностных и продольных возмущений с волновыми векторами  $\tilde{k}_3$  и  $\tilde{k}_{\perp}$ .

Подставляя эти выражения в исходную формулу (VII.8) для интенсивности дифракционного поля, в которой еще не специализовав тип структур,

$$I(k) = C^2 \iint_{(\infty)} [\rho(r) + \delta\rho(r)] [\rho(r+X) + \delta\rho(r+X)] \times \\ \times [\sigma(r)\sigma(r+X)] e^{ik \cdot X} dr dX, \quad (\text{VII.38})$$

получим шесть групп интегралов. Комбинации амплитуд

$$\rho(r)\delta\rho(r+X), \quad \rho(r+X)\delta\rho(r),$$

каждая из которых содержит по две группы членов соответственно поверхностным и продольным «шумам», не приводят к появлению рефлексов, которые можно было бы сопоставить со «штабами».

Например, в группе, содержащей поверхностные «шумы» в нитевидных структурах, с амплитудами  $b_{n_{\perp}}(\tilde{k}_3)$ ,

$$\delta I_1(k) = C^2 \sum_{l_{\perp}, n_{\perp}} a_{l_{\perp}} b_{n_{\perp}} \int_{(\infty)} e^{i[-\tilde{k}_3 n_z + (na)_{\perp} + k]X} dX \times \\ \times \int_{\Omega(X)} e^{i[(la)_{\perp} - \tilde{k}_3 n_z + (na)_{\perp}]r} dr + C^2 \sum_{l_{\perp}, n_{\perp}} a_{l_{\perp}} b_{n_{\perp}} \times \\ \times \int_{(\infty)} e^{i[(la)_{\perp} + k]X} dX \int_{\Omega(X)} e^{i[(la)_{\perp} + (na)_{\perp} - \tilde{k}_3 n_z]r} dr, \quad (\text{VII.39})$$

интегралы имеют максимальное значение, если соблюдаются условия

$$(la)_{\perp} + (na)_{\perp} = 0, \quad \tilde{k}_3 = 0.$$

При этом зависимость обеих сумм (VII.39) от компоненты волнового вектора  $\tilde{k}_3$  рентгеновского излучения не исчезает.

В этом случае оставшиеся интегралы принимают вид

$$\int_{(\infty)} e^{i[(na)_{\perp} + k]X} \Omega(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = \left| \int_V e^{i[(na)_{\perp} + k]r} dr \right|^2 = \\ = \prod_{\alpha=1}^2 \frac{\sin^2 \{[(na)_{\perp\alpha} + k_{\alpha}] N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha}/2\}}{\{[(na)_{\perp\alpha} + k_{\alpha}] N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha}/2\}^2} \frac{\sin^2 (k_3 L_3/2)}{(k_3 L_3/2)^2} V^2, \quad (\text{VII.40})$$

откуда следует, что при произвольных значениях  $k_3$

$$\partial \delta I_1(k) / \partial k_3 \neq 0 \quad \text{при} \quad \delta I_1(k) \neq 0;$$

для объяснения же «штабов» требуется

$$\left. \frac{\partial \delta I_1(k)}{\partial k_3} \right|_{\text{любые } k_3} = 0 \quad \text{при} \quad \delta I_1(k) \neq 0.$$

Рассмотрим интегралы, содержащие квадраты амплитуд поверхностных шумов:

$$\delta I_6(k) = C^2 \sum_{\substack{n_{\perp}, n'_{\perp} \\ \tilde{k}_3, \tilde{k}'_3}} b_{n_{\perp}}(\tilde{k}_3) b_{n'_{\perp}}(\tilde{k}'_3) \int_{(\infty)} e^{i[-\tilde{k}_3 n_z + (n'a)_{\perp} + k]X} d\mathbf{X} \times \\ \times \int_{\Omega(\mathbf{X})} e^{i[-\tilde{k}_3 n_z + (na)_{\perp} - \tilde{k}'_3 n'_z + (n'a)_{\perp}]r} dr. \quad (\text{VII.41})$$

Второй интеграл имеет максимальное значение при условиях

$$(na)_{\perp} + (n'a)_{\perp} = 0, \quad \tilde{k}_3 + \tilde{k}'_3 = 0.$$

Используя их, имеем

$$\delta I_6(k) = C^2 (N_1 \bar{d}_1 N_2 \bar{d}_2 L_3)^2 \sum_{n_{\perp}, \tilde{k}_3} b_{n_{\perp}}(\tilde{k}_3) b_{n_{\perp}}(-\tilde{k}_3) \times \\ \times \prod_{\alpha=1}^2 \frac{\sin^2 \{[k_{\alpha} - (na)_{\perp\alpha}] N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha}/2\}}{\{[k_{\alpha} - (na)_{\perp\alpha}] N_{\alpha} \bar{d}_{\alpha}/2\}^2} \frac{\sin^2 [(k_3 - \tilde{k}_3) L_3/2]}{[(k_3 - \tilde{k}_3) L_3/2]^2}, \quad (\text{VII.42})$$

откуда следует, что если в спектре поверхностных волн существуют волновые числа, удовлетворяющие требованию

$$k_3 - \tilde{k}_3 = 0,$$

то условия появления «штабов» выполняются, так как при этом

$$\left. \frac{\partial \delta I_6(k)}{\partial k_3} \right|_{\text{любые } k_3} = 0 \quad \text{при} \quad \delta I_6(k) \neq 0.$$

Таким образом, поверхностные шумы вдоль нитевидных (и аналогично вдоль пластинчатых) структур образуют рефлексы, которые можно отождествить со «штабами».

Остается выяснить возможность физической реализации полученного условия.

Если  $\varphi$  — угол рассеяния, отсчитываемый от нитевидных структур, то

$$k_z = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{рентг}}} \cos \varphi = \frac{\omega}{c} \cos \varphi;$$

при этом волновое число поверхностных волн в нитевидных структурах есть

$$\bar{k}_z = \tilde{\omega}/v_\phi = 2\pi/\lambda_{\text{пов.}}$$

Для реализации равенства  $k_z = \bar{k}_z$  необходимо

$$|\cos \varphi| = \left| \frac{c}{v_\phi} \frac{\tilde{\omega}}{\omega} \right| = \frac{\lambda_{\text{рентг}}}{\lambda_{\text{пов}}} \leq 1. \quad (\text{VII.43})$$

Закключаем, что полученное неравенство практически всегда выполнимо.

Резюмируя содержание этой главы, заключаем:

1) получено объединение двух полей — дифракционного для рентгеновских лучей и статистического для вероятностей местоположения и скоростей атомов в нелокальной модели кристалла. Это объединение дает новый теоретический аппарат для рентгеноструктурного анализа кристаллов;

2) показано, что основные результаты общепринятого подхода (условие Брегга, наличие фактора Дебая — Валлера, существование диффузных максимумов) вытекают также и из нелокально-статистической теории. Тем не менее, имеются принципиальные возможности различия физических условий, при которых эти результаты являются правомерными;

3) показано, что объяснение рентгеновских рефлексов в виде так называемых «штабов» в общепринятом подходе не представляется возможным;

4) появление «штабов» получает естественное объяснение при учете шумов в виде поверхностных волн в нитевидных (и пластинчатых) структурах как состояний возбуждения кристалла.

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОНОВ В ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЕ ЧЕРЕЗ ПРОМЕЖУТОЧНУЮ СИСТЕМУ (НЕЙТРАЛЬНЫЙ ГАЗ)\***

**§ 1. Матричный элемент взаимодействия через промежуточную систему**

Рассмотрим поведение ионов, находящихся в нейтральном газе и взаимодействующих с полем акустических волн в газе.

Уравнение Шредингера для двух ионов, совместно с акустическим полем, имеет вид

$$\begin{aligned}
 (H_1 + H_2 + H_3 + V_{13} + V_{23})\psi(1, 2, 3) &= i\hbar \frac{\partial \psi(1, 2, 3)}{\partial t}, \\
 V_{13} &= \int K(|r_1 - r_3|) \delta\rho_t(r_3) dr_3, \\
 V_{23} &= \int K(|r_2 - r_3|) \delta\rho_t(r_3) dr_3, \\
 \delta\rho_t(r) &= \sum_q \delta\rho_q e^{-i\omega_q t + iqr}.
 \end{aligned}
 \tag{VIII.1}$$

Здесь  $K(|r - r'|)$  — энергия взаимодействия иона, находящегося в точке  $r$ , с атомом в точке  $r'$ ;  $\delta\rho_t(r)$  — изменение плотности нейтрального газа под влиянием акустических волн, представленное рядом Фурье.

1. Исходное описание не учитывает взаимодействия ионов с фоном нейтрального газа. В нелокально-статистической теории фон описывается пространственно-однородным распределением нейтральных атомов. Как мы видели в главе I, это распределение

$$f(r, v, t) = f_0(v^2), \quad \int_{(\infty)} f_0(v^2) dv = \rho_0 = \text{const}$$

есть точное решение основного уравнения нелокальной теории (I.7).

Подобное отображение «фона» нейтрального газа приводит к важному следствию: для взаимодействия иона с фоном получается постоянная величина, не зависящая от координат иона:

$$U_{ia} = \int_{(\infty)} K_{ia}(|r - r'|) \rho_0 dr' = 4\pi\rho_0 \int_0^\infty K_{ia}(s) s^2 ds = \text{const},$$

которую можно не учитывать в общем гамильтониане системы.

\*) Вопросы в этой главе рассмотрены совместно с М. А. Яковлевым.

2. В уравнение Шредингера мы не включили кулоновское взаимодействие между ионами, так как оказалось (см. ниже), что взаимодействие через промежуточную систему на несколько порядков сильнее электростатического.

3. Мы предполагаем вначале, что гамильтониан, описывающий акустическое поле в нейтральном газе и в нелокальной теории, может быть описан суммой энергий осцилляторов волн.

В дальнейшем анализируются условия, обеспечивающие эту возможность. В последнем случае взаимодействие свободных ионов с фононами в первом приближении отсутствует; отличными от нуля являются эффекты, начиная со второго порядка. По аналогии со случаем, когда промежуточной системой является мезонное поле, мы пренебрегаем многофононными обменами, выступающими в высших приближениях.

Матричный элемент энергии взаимодействия двух свободных частиц, каждая из которых взаимодействует с промежуточной системой (совокупностью волн), определяется формулой [37]

$$\langle k, k | K | k - q, k + q \rangle = \frac{2\hbar\omega_q |M_{k, k-q}|^2}{[\varepsilon(k) - \varepsilon(k - q)]^2 - (\hbar\omega_q)^2}. \quad (\text{VIII.2})$$

Здесь  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_i$ ;  $\omega_q, q$  — частота и волновой вектор соответствующих волн,  $M_{k, k-q}$  — матричный элемент энергии взаимодействия каждой частицы порознь с промежуточной системой

$$M_{k, k-q} = \int \psi_k^*(r) \delta U(r) \psi_{k-q}(r) dr, \quad \psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ikr}. \quad (\text{VIII.3})$$

В этих формулах характер волн промежуточной системы не специализирован. В нашем случае

$$\delta U(r) \equiv V_{ia}(r) = \int K_{ia}(|r - r'|) \delta\rho_t(r') dr', \quad (\text{VIII.4})$$

где  $K_{ia}(|r - r'|)$  — энергия взаимодействия иона с атомом.

Учитывая фурье-представление для  $\delta\rho_t(r)$ , получаем

$$M_{k, k-q} = \sum_{q'} \delta\rho_{q'} \sigma_{ia}(q') e^{-i\omega_{q'} t} \frac{1}{\Omega} \int_{(\Omega)} e^{i(q'-q)r} dr, \quad (\text{VIII.5})$$

где

$$\sigma_{ia}(q) = 4\pi \int_0^\infty K_{ia}(s) \frac{\sin qs}{qs} s^2 ds, \quad (\text{VIII.6})$$

откуда следует

$$|M_{k, k-q}|^2 = (\delta\rho_q)^2 \sigma_{ia}^2(q). \quad (\text{VIII.7})$$

Таким образом, квадрат матричного элемента энергии взаимодействия иона с акустическим полем выражается через две характерные величины — интенсивность акустического поля и

Фурье-образ взаимодействия иона с этим полем, зависящий от волнового числа акустических волн.

Определим энергию взаимодействия ионов как функцию расстояния между ними.

Преобразуем знаменатель в исходной формуле для матричного элемента:

$$[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q})]^2 - (\hbar\omega_q)^2 \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)^2 q^2 (q - q^+)(q + q^+),$$

$$\omega_q = v_\phi(q) \cdot q, \quad \frac{2kq}{|q|} \ll |q|, \quad q^+ = \frac{2m_i v_\phi(q)}{\hbar}. \quad (\text{VIII.8})$$

Пренебрегая зависимостью взаимодействия от скоростей ионов, замечаем, что матричный элемент выражается только через модуль волнового вектора акустических волн  $q = |q|$ .

Учитывая, что выражение энергии взаимодействия в пространстве волновых векторов и вид этой энергии в пространстве координат связаны трансформацией Фурье, имеем

$$K_{ii}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \langle \mathbf{k}, \mathbf{k} | K_{ii} | \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{q} =$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q_{\max}} \langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle \frac{\sin q |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{q |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} 4\pi q^2 dq, \quad (\text{VIII.9})$$

где введена граничная частота акустического спектра  $q_{\max}$ ; интеграл в (VIII.9) понимается в смысле главного значения и

$$\langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle = \frac{2(\delta\rho_q)^2 \sigma_{ia}(q) \omega_q}{\left(\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)^2 q^2 (q - q^+)(q + q^+)}. \quad (\text{VIII.10})$$

Возникает вопрос о конкретизации функций  $(\delta\rho_q)^2$ ,  $\sigma_{ia}(q)$ ,  $v_\phi(q)$ .

Заметим, что поскольку  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle = 0$ , то и  $K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  не зависит от времени — это свойство взаимодействий через промежуточную систему замечательно, так как акустическое поле, вызывающее это взаимодействие, явно зависит от времени.

Взаимодействие ионов через промежуточную систему определяется двумя характерными свойствами акустического поля: интенсивностью  $(\delta\rho_q)^2$  и дисперсией, входящей посредством равенств

$$\omega_q = v_\phi(q) q, \quad q^+ = \frac{2m_i}{\hbar} v_\phi(q), \quad (\text{VIII.11})$$

## § 2. Характеристики акустического поля в нейтральном газе в нелокально-статистической теории

Распространение акустических волн в нейтральном газе в случае пространственно-однородного распределения частиц определяется следующим уравнением:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r \Phi - \frac{1}{m_a} \nabla_r U \{ \Phi \} \nabla_v \Phi - \frac{1}{m_a} \nabla_r U \{ f_0 \} \nabla_v \Phi - \frac{1}{m_a} \nabla_r U \{ \Phi \} \nabla_v f_0 = 0, \quad (\text{VIII.12})$$

где

$$\begin{aligned} \dot{U} \{ \Phi \} &= \int K_{aa} (| \mathbf{r} - \mathbf{r}' |) \Phi (\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}, \\ U \{ f_0 \} &= \int K_{aa} (| \mathbf{r} - \mathbf{r}' |) f_0 (v^2) d\mathbf{r}' d\mathbf{v} \\ (f (\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) &= f_0 (v^2) + \Phi (\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)). \end{aligned}$$

Полагая нелинейный член малым и учитывая, что для «фона»  $\nabla_r U \{ f_0 \} = 0$ , применяя далее преобразование Фурье по координатам и преобразование Лапласа по времени (см. главу VI, а также работы [7] и [17]) и предполагая, что волны распространяются вдоль одной из осей координат ( $x$ ), получим в первом и втором приближении следующие формулы:

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(x, v, t) &= \delta \rho_\eta \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \frac{\partial_v \tilde{f}_0}{v - \omega/q} \cos(\omega t - qx) \\ (\tilde{f}_0(v^2) &= \frac{1}{\rho_0} \int_{(\infty)} f_0(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) dv_x dv_y dv_z), \quad (\text{VIII.13}) \end{aligned}$$

$$\varphi^{(2)}(x, v, t) = (\delta \rho_\eta)^2 \frac{\sigma_{aa}^2(q) \rho_0}{4m_a^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[ \frac{\partial_v \tilde{f}_0}{(v - \omega/q)^2} \right] + Q(e^{-i\omega t}) + Q(e^{-2i\omega t}),$$

где слагаемые, обозначенные через  $Q$ , пропорциональны осциллирующим членам.

В качестве условия разрешимости первого приближения имеем дисперсионное уравнение

$$\frac{\theta}{2\rho_0 \sigma_{aa}(q)} = - \int_0^\infty x e^{-x^2} \cos vx dx \equiv I(v), \quad (\text{VIII.14})$$

$$v = \frac{\omega}{qv_T}, \quad v_T = \left( \frac{\theta}{2m_a} \right)^{1/2},$$

связывающее  $\omega$  и  $q$ .

Указанные формулы имеют место для слабого затухания волн. В этом случае, при переходе к средним величинам, интегралы можно понимать в смысле главного значения.

Общий характер зависимости  $\omega = \omega(q)$ , представляющий решение дисперсионного уравнения, соответствует рис. 6, а.

Характерным для дисперсионной кривой является наличие максимального значения волнового числа и частоты и отсутствие дисперсии для длинных волн (при  $q \rightarrow 0$ ). В последнем случае

$$v_{\Phi}^2 \rightarrow \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} + \frac{3\theta}{m_a} + \dots \quad (\text{VIII.15})$$

Рассмотрим вопрос о возможности представления энергии акустического поля в виде суммы энергий акустических осцилляторов. Квантовомеханические формулы для взаимодействия через промежуточную систему основываются на подобном представлении.

Это свойство акустического поля не является очевидным в статистической теории.

Усредненные по времени значения плотности кинетической и потенциальной энергии волн таковы:

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_k^t &= \int_{(\infty)} \frac{m_a v^2}{2} \overline{(\varphi^{(1)} + \varphi^{(2)})^t} dv, \\ \bar{\epsilon}_\pi^t &= \frac{1}{2} \iint K_{aa}(|r - r'|) \overline{\delta\rho^{(1)}(x, t) \delta\rho^{(1)}(x', t)^t} dr dr', \quad (\text{VIII.16}) \\ \delta\rho^{(1)}(x, t) &= \int_{(\infty)} \varphi^{(1)}(x, v, t) dv. \end{aligned}$$

Имеет место качественная разница интегралов, появляющихся в общепринятом подходе, и интегралов в (VIII.16), поэтому характерное свойство осцилляторов:  $\bar{\epsilon}_k^t = \bar{\epsilon}_\pi^t$  — в нелокальной теории, вообще говоря, места не имеет. Выясним количественное различие между указанными величинами.

Первое приближение  $\varphi^{(1)}$  гармонически меняется с течением времени, поэтому оно не вносит вклада в среднюю величину кинетической энергии волн. Во втором приближении имеется постоянная составляющая функции распределения  $\varphi^{(2)}$ , которая и определяет  $\bar{\epsilon}_k^t$ :

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_k^t &= \int_{(\infty)} \frac{m_a v^2}{2} \varphi^{(2)} dv = \frac{\sigma_{aa}^2(q) \rho_0}{8m_a} (\delta\rho_q)^2 \int_{-\infty}^{\infty} v^2 \frac{\partial}{\partial v} \left[ \frac{\partial_v \bar{f}_0}{(v - \omega/q)^2} \right] dv = \\ &= - (\delta\rho_q)^2 \frac{\sigma_{aa}^2(q) \rho_0}{4m_a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v \partial_v \bar{f}_0}{(v - \omega/q)^2} dv \quad (\text{VIII.17}) \end{aligned}$$

или

$$\bar{\epsilon}_k^t = - \frac{\sigma_{aa}^2(q) \rho_0}{4m_a} (\delta\rho_q)^2 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv + \frac{\omega}{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{(v - \omega/q)^2} dv \right]. \quad (\text{VIII.18})$$

Воспользовавшись дисперсионным уравнением в форме

$$1 - \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv = 0$$

и интегрируя по частям

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{(v - \omega/q)^2} dv = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv,$$

получаем

$$\bar{\epsilon}_k^t = -\frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta \rho_q)^2 \left[ 1 + \frac{\omega}{q} \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv \right]. \quad (\text{VIII.19})$$

Вычислим интеграл в (VIII.19):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q + i\alpha} dv + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q - i\alpha} dv \right).$$

Дважды интегрируя по частям в первом члене, имеем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q + i\alpha} dv &= \int_{-\infty}^{\infty} \partial_v^2 \bar{f}_0 dv \int_0^T e^{i(v - \omega/q + i\alpha)t} dt (-i) = \\ &= \int_0^T e^{i(-\omega/q + i\alpha)t} dt \int_{-\infty}^{\infty} \partial_v^2 \bar{f}_0 e^{ivt} dv (-i) = \\ &= i \int_0^T e^{i(-\omega/q + i\alpha)t} t^2 e^{-\theta t^2/2m_a} dt. \end{aligned} \quad (\text{VIII.20})$$

Проводя аналогичные преобразования для второго члена и полагая в конечном результате  $T \rightarrow \infty$  и  $\alpha \rightarrow 0$ , получаем окончательно

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v^2 \bar{f}_0}{v - \omega/q} dv &= \left( \frac{2m}{\theta} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx, \\ v &= \frac{\omega}{qv_T}, \quad v_T = \left( \frac{\theta}{2m_a} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{VIII.21})$$

Таким образом, выражение средней кинетической энергии в (VIII.16) принимает вид

$$\bar{\epsilon}_k^t = -\frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta \rho_q)^2 \left[ 1 + \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m} \frac{\omega}{q} \left( \frac{2m_a}{\theta} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx \right]. \quad (\text{VIII.22})$$

Интеграл в правой части выражается через ранее введенную специальную функцию  $I(v)$

$$I(v) = - \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos vx dx, \quad I'(v) = \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx.$$

Перейдем к вычислению средней потенциальной энергии акустических колебаний. Используя первое приближение  $\varphi^{(1)}$ , имеем

$$\bar{\varepsilon}_{\pi}^t = \frac{1}{4} (\delta\rho_q)^2 \int K_{aa}(|r-r'|) \cos q(x-x') dr' = \frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta\rho_q)^2. \quad (\text{VIII.23})$$

Убеждаемся, что

$$\bar{\varepsilon}_k^t \neq \bar{\varepsilon}_{\pi}^t. \quad (\text{VIII.24})$$

Однако рассмотрим область достаточно больших фазовых скоростей звуковых волн

$$v_{\Phi} \gg v_T = \left( \frac{\theta}{2m_u} \right)^{1/2}.$$

В этом случае  $v \gg 1$  и можно воспользоваться асимптотическим выражением функции  $I(v)$  для больших значений  $v$

$$I(v)|_{v \gg 1} \rightarrow \frac{1}{v^2},$$

и, следовательно,

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} \sin vx dx |_{v \gg 1} \rightarrow - \frac{2}{v^3};$$

при этом дисперсионное уравнение (VIII.14) принимает вид

$$\frac{\theta}{2\rho_0 \sigma_{aa}(q)} \rightarrow \frac{v_T^2}{v_{\Phi}^2}, \quad v_{\Phi}^2 \rightarrow \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a}. \quad (\text{VIII.25})$$

Подставляя асимптотические значения величин в формулу средней кинетической энергии, получаем

$$\bar{\varepsilon}_k^t = \frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta\rho_q)^2, \quad (\text{VIII.26})$$

что совпадает со средним значением потенциальной энергии волн. В результате при условии

$$\frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \gg \frac{\theta}{2m_a} \quad (\text{VIII.27})$$

имеет место равенство

$$\bar{\varepsilon}_k^t = \bar{\varepsilon}_{\pi}^t. \quad (\text{VIII.28})$$

Таким образом, для достаточно больших плотностей нейтрального газа и малых температур акустическое поле представимо суммой осцилляторов.

Проведенное рассмотрение предполагало (неявно) специальный способ возбуждения акустического поля с помощью начальных возмущений среды, вызывающих волновые процессы для  $t > 0$ , причем требовалось, чтобы для  $t < 0$  акустическое поле отсутствовало. Это требование необходимо при использовании преобразования Лапласа, которое приводит к затуханию волн (см. главу IV).

Однако указанное условие исключает акустические шумы в среде, для которых требование их отсутствия при  $t < 0$  является неестественным, так как «шумы» существуют как в «будущем»

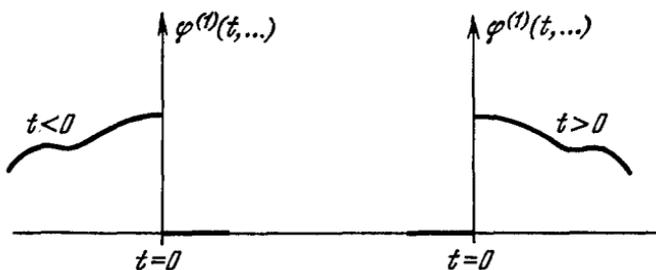


Рис. 15.

(для  $t > 0$ ), так и в «прошлом» (для  $t < 0$ ) (рис. 15). Для выяснения роли «шумов» в задаче о возможности представления акустических колебаний в виде суммы осцилляторов присоединим к задаче на «отклик» системы на начальное возмущение другую задачу, в которой

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(x, v, t) &\neq 0 \quad \text{для } t < 0, \\ \varphi^{(1)}(x, v, t) &= 0 \quad \text{для } t > 0. \end{aligned} \quad (\text{VIII.29})$$

Сумма обоих решений может претендовать на отображение реальных «шумов» в нейтральном газе. В отличие от первой задачи, во второй задаче возникает не затухание амплитуд волн, а их возрастание с течением времени.

Уравнения, отображающие рассматриваемые два процесса, должны переходить друг в друга при замене знака у времени  $t \rightarrow -t$ . Для интересующей нас области (отрицательных времен) исходное уравнение (VIII.12) имеет вид

$$-\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \nabla_r \varphi - \frac{1}{m_a} \nabla_r U \{ \varphi \} \nabla_v f_0 - \frac{1}{m_a} \nabla_r U \{ \varphi \} \nabla_v \varphi = 0, \quad (\text{VIII.30})$$

$$U \{ \varphi \} = \int K_{aa} (|r - r'|) \varphi(r', v, t) dr' dv.$$

Решение первого приближения можно записать в случае волн, распространяющихся по оси  $x$ , в виде

$$\varphi^{(1)}(x, v, t) = \frac{1}{2} g(v) e^{-ipt - iqx} + \frac{1}{2} g^+(v) e^{ip^+t + iqx}, \quad (\text{VIII.31})$$

$$p = \omega + i\gamma, \quad g(v) = \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{v + p/q} \delta \rho_q.$$

Для определения второго приближения получаем уравнение

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial \varphi^{(2)}}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi^{(2)}}{\partial x} - \\ & -\frac{1}{m_a} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \int K_{aa}(|r - r'|) \varphi^{(2)}(x', v, t) dr' dv \right] \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial v} \rho_0 = \\ & = \frac{iq}{4m_a} \sigma_{aa}(q) \left[ \frac{\partial g}{\partial v} \int_{(\infty)} g^+(v) dv - \frac{\partial g^+}{\partial v} \int_{(\infty)} g(v) dv \right] e^{2\gamma t} + Q(x, v, t), \end{aligned} \quad (\text{VIII.32})$$

где  $Q(x, v, t)$  — осциллирующие члены.

Будем интересоваться пространственно-однородной частью акустического поля во втором приближении. Положим

$$\varphi^{(2)}(v, t) = \varphi^{(2)}(v) e^{2\gamma t}, \quad |\gamma| \rightarrow 0; \quad (\text{VIII.33})$$

подстановка дает

$$\varphi^{(2)}(v) = -\frac{iq}{8m_a} \sigma_{aa}(q) \frac{1}{\gamma} \left[ \frac{\partial g}{\partial v} \int_{(\infty)} g^+(v) dv - \frac{\partial g^+}{\partial v} \int_{(\infty)} g(v) dv \right]. \quad (\text{VIII.34})$$

Если преобразовать эту формулу с использованием выражений для  $g(v)$  и  $p$ , а затем учесть малость коэффициента  $\gamma$ , то получим

$$\varphi^{(2)}(v) = -\frac{\sigma_{aa}^2(q) \rho_0}{4m_a^2} (\delta \rho_q)^2 \frac{\partial}{\partial v} \left[ \frac{\partial_v \bar{f}_0}{(v + \omega/q)^2} \right]. \quad (\text{VIII.35})$$

Эта формула отличается знаком от аналогичной формулы исследованной выше задачи на «отклик» системы на начальное возмущение для  $t > 0$ .

Дисперсионное уравнение для второй постановки задачи имеет вид

$$1 - \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial_v \bar{f}_0}{|v + \omega/q|} dv = 0, \quad (\text{VIII.36})$$

оно приводится к тому же виду (VIII.14).

Хотя форма дисперсионного уравнения не изменилась, однако роль различных ветвей дисперсионной кривой  $\omega = \omega(q)$  для обоих рассматриваемых процессов существенно различна.

Верхняя ветвь (см. рис. 6) соответствует затуханию волн, поэтому она описывает первый случай. Мы убедились выше (см. главу IV, § 3), что в случае сред, которые можно рассматривать находящимися в аморфном состоянии, для нижней ветви дисперсионной кривой коэффициент затухания  $\gamma$  изменяет знак и имеет место возрастание амплитуд акустических волн с увеличением времени.

Подсчитывая кинетическую энергию волн (для  $t < 0$ ), на основе второго приближения  $\varphi^{(2)}$  получим

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_k^t &= \int_{(\infty)} \frac{m_a v^2}{2} \varphi^{(2)} dv = \\ &= \frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta\rho_q)^2 \left[ 1 + \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} \frac{\omega}{q} \left( \frac{2m_a}{\theta} \right)^{3/2} \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} \cos vx dx \right]. \end{aligned} \quad (\text{VIII.37})$$

Это выражение отличается от аналогичного для первой ветви знаком перед квадратной скобкой и значением интеграла в правой части, поскольку значение  $v$  относится к другой ветви дисперсионной кривой.

Заметим, что для рассматриваемого второго случая величина средней потенциальной энергии акустического поля осталась неизменной.

Потенциальная энергия определяется через квадрат амплитуды первого приближения; после усреднения по времени знак направления времени не оказал влияния на конечный результат:

$$\bar{\epsilon}_k^t = \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{4} (\delta\rho_q)^2. \quad (\text{VIII.38})$$

Исследуем специальную функцию в окрестности  $v \sim 3$ , которая соответствует случаю малых плотностей или высоких температур. Специальная функция

$$\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} \sin vx dx = \frac{dI(v)}{dv}$$

изменяет знак при переходе  $v$  через точку  $\tilde{v} \approx 3$ ; в окрестности этой точки возможно представление функции в виде ряда Тейлора

$$\frac{dI(v)}{dv} = I'(\tilde{v}) + I''(\tilde{v})(v - \tilde{v}) + \frac{1}{2} I'''(\tilde{v})(v - \tilde{v})^2 + \dots,$$

причем  $I'(\tilde{v}) = 0$ . Используя это разложение в выражении  $\bar{\epsilon}_k^t$ , заключаем, что в окрестности  $v \sim \tilde{v}$  второй член в квадратных скобках (VIII.37) является малым в сравнении с первым (т. е. с единицей). В этом случае

$$\bar{\epsilon}_k^t = \frac{\sigma_{aa}(q)}{4} (\delta\rho_q)^2 \quad (\text{VIII.39})$$

и, таким образом, средняя кинетическая энергия волн совпадает со средней потенциальной энергией в районе малых плотностей и высоких температур. Условием применимости полученного результата является неравенство

$$\frac{2\sigma_{aa}(q)\rho_0}{\theta} v(v - \tilde{v}) I''(\tilde{v}) \ll 1 \quad (\text{VIII.40})$$

при условии, что значение  $v$  есть решение дисперсионного уравнения (VIII.14). Район значений фазовой скорости  $v_{\Phi} \approx 3 v_T$  одновременно удовлетворяет обоим условиям.

Таким образом, представление энергии акустического поля в нелокально-статистической теории в виде суммы осцилляторов оказывается возможным в двух случаях:

1. В условиях, когда акустическое поле создается возмущениями в начальный момент времени и рассматриваются волны для  $t > 0$ , при наличии затухания волн.

2. В условиях, когда акустическое поле выступает в качестве «шумов» в системе для всех времен в интервале  $-\infty < t < +\infty$ .

Обе задачи отличаются значениями параметров сред (плотностью и температурой), для которых они применимы. Они характеризуются также различием дисперсии акустических волн. Фазовые скорости волн для  $q \rightarrow 0$  в первой задаче стремятся к значению

$$v_{\Phi}^2 \rightarrow \sigma_{aa}(q) \rho_0 / m_a,$$

во второй — к другой величине:

$$v_{\Phi}^2 \rightarrow 4,5 \theta / m_a.$$

Перейдем к определению полной энергии акустических колебаний в условиях температурного равновесия. Полная энергия системы акустических осцилляторов не должна зависеть от способа рассмотрения, поэтому имеем

$$E = \sum_q \frac{1}{2} \sigma_{aa}(q) (\delta\rho_q)^2 \Omega = \sum_q \left( n_q + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_q. \quad (\text{VIII.41})$$

Отсюда

$$(\delta\rho_q)^2 = \frac{(n_q + 1/2) \hbar\omega_q}{1/2 \sigma_{aa}(q) \Omega}, \quad n_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/\theta) - 1}. \quad (\text{VIII.42})$$

Полученная формула для квадрата амплитуды изменения плотности нейтрального газа в акустическом поле, в указанной общей форме, остается справедливой для обоих рассмотренных выше случаев плотности и температур этого газа.

В исходную формулу для взаимодействия ион — ион<sup>+</sup> входит фурье-образ взаимодействия ион — атом ( $\sigma_{ia}(q)$ ). Для детализации этого коэффициента рассмотрим два крайних случая — малых и больших кинетических энергий сближения этих частиц.

Для малых энергий сближения преобладает эффект электрической поляризации атома кулоновским полем иона. Энергия поляризации определяется коэффициентом поляризации  $\beta = a^3$ , где  $a$  — эффективный радиус атома, а также наименьшим расстоянием сближения иона с атомом.

К известному выводу энергии поляризации кулоновским полем точечного заряженного центра присоединим дополнение.

В реальных условиях кулоновское поле иона в плазме экранировано дебаевской поляризацией электронов. Учитывая поляризацию атома экранированным кулоновским центром, получим для энергии поляризации следующую формулу:

$$K_{ia}(s) = -e^2\beta \frac{1}{s^4} (1 + \kappa_D s)^2 e^{-2\kappa_D s}, \quad (\text{VIII.43})$$

где

$$s \geq a, \quad \kappa_D^2 = 4\pi N e^2 / \theta_e.$$

Фурье-образ этого взаимодействия есть

$$\sigma_{ia}(q) = -4\pi e^2 \beta q \left[ \frac{\sin qa}{(qa)^2} + \frac{\cos qa}{qa} + \text{Si}(qa) \right], \quad (\text{VIII.44})$$

с учетом, что  $a\kappa_D \ll 1$ .

При больших кинетических энергиях сближения взаимодействие иона с атомом описывается экранированным потенциалом Томаса — Ферми.

Введем поправку к указанной энергии взаимодействия в виде наличия «непроницаемой сферы», зависящей от кинетической энергии сближения ион — атом, тогда имеем

$$K_{ia}(s) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{s} e^{-\kappa s}, & s \geq s_0, \\ \infty, & s < s_0, \end{cases} \quad (\text{VIII.45})$$

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{s_0} e^{-\kappa s_0} = \frac{m v^2}{2}, \quad \kappa^{-1} = a_B \cdot 0,8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}.$$

Фурье-образ этого взаимодействия выражается формулой

$$\sigma_{ia}(q) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{q^2 + \kappa^2} \left( \cos qs_0 + \frac{\kappa}{q} \sin qs_0 \right) e^{-\kappa s_0}. \quad (\text{VIII.46})$$

Перейдем к оценке фурье-образа взаимодействия атом — атом, входящего в выражение средней амплитуды акустических колебаний (VIII.42), в условиях температурного равновесия. В случае достаточно плотной нейтральной среды и при достаточно невысоких температурах фазовая скорость акустических волн определяется формулой

$$v_{\Phi}^2 = \frac{\sigma_{aa}(q) \rho_0}{m_a} + \frac{3\theta}{m_a} + \dots, \quad (\text{VIII.47})$$

откуда интересующий нас фурье-образ  $\sigma_{aa}(q)$  определяется через эмпирическое значение фазовой скорости звука в газовой среде.

### § 3. Определение функционального вида энергии взаимодействия ион—ион через акустическое поле в нейтральном газе

Рассмотрим прежде всего случай достаточно высоких плотностей и невысоких температур нейтрального газа, который анализировался в § 2 в отношении дисперсии звука и возможности описания его энергии с помощью осцилляторов.

В § 1 этой главы была получена следующая формула, определяющая энергию взаимодействия двух ионов, находящихся в поле звуковых волн:

$$K_{ii}(s) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q_{\max}} \langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle \frac{\sin qs}{qs} 4\pi q^2 dq, \quad (\text{VIII.48})$$

$$\langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle = \frac{2(\delta\rho_q)^2 \sigma_{ia}^2(q) \hbar\omega_q}{\left(\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)^2 q^2 \left[ q - \frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q) \right] \left[ q + \frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q) \right]},$$

где  $(\delta\rho_q)^2$  дается (VIII.42). Мы видим, что налицо зависимость взаимодействия от интенсивности акустического поля, дисперсии акустических волн и взаимодействия ион—атом, атом—атом. Необходимо учесть, конечно, наличие дисперсионного уравнения (VIII.14).

Принимаем во внимание только верхнюю часть дисперсионной кривой: для рассматриваемого случая четность подынтегрального выражения (VIII.48) относительно знака  $q$  позволяет представить его в виде

$$\frac{F(q) \sin qs}{[q - q^+(q)] [q + q^+(q)]}, \quad (\text{VIII.49})$$

где

$$F(q) = \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{2mv_\Phi(q)}{\hbar} \right)^2 \frac{(n_q + 1/2) \sigma_{ia}^2(q) q}{\sigma_{aa}(q)}.$$

С помощью (VIII.49) приходим к следующим четырем интегралам, вычисляемым с помощью теории вычетов:

$$\int_{-q_{\max}}^{q_{\max}} \frac{\tilde{F}(q) e^{\pm iqs}}{q \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q)} dq = \pm \pi i \frac{\tilde{F}(q^+) e^{\pm iq^+s}}{\sigma_{aa}(q)} \quad (\text{VIII.50})$$

$$(\tilde{F} = F/2i).$$

При этом предположено, что

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad & q^+ \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q^+) = 0, \\ \text{б)} \quad & 1 \mp \frac{2m_i}{\hbar} \frac{dv_\Phi(q^+)}{dq^+} \neq 0, \\ \text{в)} \quad & q_{\max} > q^+, \end{aligned} \quad (\text{VIII.51})$$

где  $\pm q^+$  здесь и в дальнейшем будут обозначать корни уравнения (VIII.51а). Существование действительного корня уравнения

$$q^+ = \frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q^+) \quad (\text{VIII.51}')$$

видно из наличия пересечения кривых, изображающих функции  $v_\Phi(q)$  и  $q$ . При этом условие  $q_{\max} > q^+$  будет автоматически выполняться, если

$$\frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q_{\max}) \leq q_{\max}.$$

Для выяснения справедливости этого неравенства используем графическое представление условия разрешимости дисперсионного уравнения (см. рис. 5). Учтем, что так как для больших значений  $q$  нет решений в виде волн,  $q_{\max}$  должно удовлетворять требованию

$$\frac{\theta}{2\rho_0\sigma_{aa}(q_{\max})} = 0,14. \quad (\text{VIII.52})$$

В точке максимума функции  $I(\nu)$  значение  $\nu$  равно 3, следовательно,

$$v_\Phi(q_{\max}) \approx 3 v_T.$$

С другой стороны, если определять величину  $q_{\max}$  из критического условия (VIII.52), используя простейший отгалкивательный потенциал взаимодействия атомов

$$K_{aa}(s) = \frac{G}{s} e^{-\kappa s},$$

$$\sigma_{aa}(q) = 4\pi \int_0^\infty K_{aa}(s) \frac{\sin qs}{qs} s^2 ds = \frac{4\pi G}{q^2 + \kappa^2},$$

получаем уравнение для определения  $q_{\max}$

$$\frac{\theta}{2\rho_0 4\pi G} (q_{\max}^2 + \kappa^2) = 0,14,$$

откуда

$$q_{\max}^2 = \kappa^2 \left( \frac{4\pi G \rho_0 \cdot 2 \cdot 0,14}{\theta \kappa^2} - 1 \right). \quad (\text{VIII.53})$$

Таким образом, существование действительного корня  $q^+$  уравнения (VIII.51а) обеспечивается условием

$$\frac{2m_i}{\hbar} v_{\Phi}(q_{\max}) = \frac{6m_i v_T}{\hbar} \leq \kappa \left( \frac{4\pi G \rho_0 2 \cdot 0,14}{\theta \kappa^2} - 1 \right)^{1/2}. \quad (\text{VIII.54})$$

Знак неравенства осуществляется при достаточной плотности газа, малой температуре и малом атомном весе ионов.

Возникает вопрос: накладывает ли дополнительные условия на параметры среды требование в (VIII.51б)? Из дисперсионного уравнения следует

$$v'_{\Phi}(\pm q) = - \frac{\theta}{2\rho_0 \sigma_{aa}^2(q)} \sigma'_{aa}(q) \frac{1}{I'(v)} v_T;$$

легко видеть, что, поскольку  $I'(v) < 0$ ,

$$1 \mp \frac{2m_i}{\hbar} v'_{\Phi}(\pm q^+) > 0.$$

Таким образом, требование, накладываемое на  $v'_{\Phi}(\pm q^+)$ , выполняется без дополнительных ограничений.

Поставим вопрос о взаимодействии ион — ион на достаточно малых расстояниях между ними.

В интеграле

$$K_{ii}(s) = \int_0^{q_{\max}} \langle \dots | K_{ii} | \dots \rangle \frac{\sin qs}{qs} 4\pi q^2 dq,$$

если  $q_{\max}s < \pi$ , осциллирующий синус можно приближенно заменить единицей; в этом случае  $K_{ii}(s) = \text{const}$  и взаимодействие между ионами выключается ( $\text{grad}_s K_{ii}(s) = 0$ ).

Получаем окончательный результат: взаимодействие между ионами через промежуточную систему (нейтральный газ) выражается следующей функцией расстояния между ними:

$$K_{ii}(s) = \begin{cases} \frac{\gamma^2}{1 - 2m_i v'_{\Phi}(q^+)/\hbar} \frac{\cos q^+ s}{s} & \text{для } s > \frac{\pi}{q_{\max}}, \\ \text{const} & \text{для } s < \frac{\pi}{q_{\max}}, \end{cases} \quad (\text{VIII.55})$$

где

$$\gamma^2 = \frac{1}{\pi} \frac{(n_{q^+} + 1/2) q^{+2} \sigma_{ia}(q^+)}{\sigma_{aa}(q^+)},$$

а  $q^+$  есть корень уравнения (VIII.51'). Оценим порядок фигурирующих в (VIII.55) величин.

## 1. В области малой дисперсии акустических волн

$$\frac{2m_i}{\hbar} v_{\Phi}'(q^+) < 1$$

закон взаимодействия между ионами (VIII.55) принимает более простую форму:

$$K_{ii}(s) = \begin{cases} \gamma^2 \frac{\cos q^+ s}{s} & \text{для } s > \frac{\pi}{q_{\max}}, \\ \text{const} & \text{для } s < \frac{\pi}{q_{\max}}, \end{cases}$$

где  $\gamma^2$  играет роль квадрата «заряда» в новом взаимодействии.

2. Значение  $q^+$  можно оценить, заимствуя величину фазовой скорости волн из опытных данных.

На основании формулы (VIII.51') имеем, полагая  $v_{\Phi} \sim 10^5$  см/сек,  $m_N \approx 14 \cdot 1,7 \cdot 10^{-24}$  г,

$$q^+ \sim 10^9 \text{ см}^{-1},$$

что соответствует гиперзвуковым длинам волн, причем оценка  $q^+$  основывается на экстраполяции значений обычных фазовых скоростей звука на области высоких частот.

3. В коэффициент  $\gamma^2$  входит фурье-образ взаимодействия атом—атом  $\sigma_{aa}(q^+)$ .

В рассматриваемой области достаточно больших плотностей и не очень высоких температур мы видели выше, что величину фазовой скорости можно описывать формулой

$$v_{\Phi}^2 \approx \sigma_{aa}(q^+) \rho_0 / m_a,$$

отсюда определяется коэффициент  $\sigma_{aa}(q^+)$  по известным значениям  $v_{\Phi}^2$ ,  $\rho_0$ ,  $m_a$ .

4. Оценим величину  $n_q + 1/2$ , которая содержится в формуле для  $\gamma^2$ . Исходя из равенств  $\omega_{q^+} = v_{\Phi} q^+$ ,  $q^+ = 2 m_i v_{\Phi}(q^+) / \hbar$ , имеем

$$\hbar \omega_{q^+} / \theta = 2 m_i v_{\Phi}^2 / \theta.$$

В нашем приближении

$$v_{\Phi}^2 \approx \frac{\sigma_{aa}(q^+) \rho_0}{m_a} + \frac{3\theta}{m_a} + \dots$$

температурный член является малой добавкой:

$$v_{\Phi}^2 > \frac{3\theta}{m_a},$$

откуда следует

$$\frac{\hbar \omega_{q^+}}{\theta} \gg 1 \quad \text{и} \quad n_{q^+} + \frac{1}{2} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{q^+} / \theta} - 1} + \frac{1}{2} \approx \frac{1}{2}.$$

5. Наконец, взаимодействие ион — атом входит через фурье-образ:

$$\sigma_{ia}(q^+) = -4\pi e^2 \beta q^+ \left[ \frac{\sin q^+ a}{(q^+ a)^2} + \frac{\cos q^+ a}{q^+ a} + \text{Si}(q^+ a) \right].$$

На основании оценки  $1/q^+ \sim 10^9 \text{ см}^{-1}$  можно считать, что  $q^+ \sim 1/a$ , где  $a$  — наименьшее расстояние при сближении иона с атомом. Таким образом, получаем возможность выразить величину  $\sigma_{ia}(q^+)$  через известные величины:

$$\sigma_{ia} \approx -4\pi e^2 \beta q^+ \cdot 0,8.$$

В результате определения порядка величин, фигурирующих в пунктах 1—5, численное значение параметра  $\gamma^2$  оказывается равным

$$\gamma^2 \approx 5,7 \cdot 10^{-15} \text{ эрг} \cdot \text{см}.$$

Сравним величину  $\gamma^2$ , играющую роль квадрата эффективного «заряда» во взаимодействии через промежуточную систему, с электрическим элементарным квадратом заряда

$$e^2 \approx 23 \cdot 10^{-20} \text{ эрг} \cdot \text{см};$$

приходим к заключению, что взаимодействие через промежуточную систему превышает кулоновское на несколько порядков.

Перейдем к детализации взаимодействия ион — ион в условиях низких плотностей нейтрального газа и достаточно высоких температур. Ранее предполагалось при вычислении интегралов

$$K_{ii}(s) = \frac{1}{s} \sum_{(\pm)} \int_{-q_{\max}}^{q_{\max}} \frac{\tilde{F}(q) e^{\pm iqs}}{2m_i \mp \frac{\hbar}{v_{\phi}(q)}} dq,$$

$$F(q) = \frac{F(q)}{2q}, \quad F(q) = \frac{(n_q + 1/2) \sigma_{ia}^2(q)}{\sigma_{aa}(q)} \frac{q}{\pi} \left( \frac{2m_i}{\hbar} \right)^2,$$

что имеется особенность в виде простого полюса

$$1 \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_{\phi}'(q^+) \neq 0.$$

Теперь рассмотрим случай, когда имеется кратный полюс

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad & q^+ \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_{\phi}(q^+) = 0, \\ \text{б)} \quad & 1 \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_{\phi}'(q^+) = 0. \end{aligned} \tag{VIII.56}$$

Последнее условие указывает на наличие касания биссектрисы  $q$  ко второй ветви зависимости  $2m_i v_{\phi}(q)/\hbar$  (рис. 16, б). Вторая ветвь,

как мы видели ранее, соответствует акустическому спектру в случае низких плотностей и высоких температур.

Применяя теорию вычетов, получаем

$$\int_{-q_{\max}}^{q_{\max}} \frac{\tilde{F}(q) e^{\pm iqs}}{q \mp 2m_i v_{\Phi}(q)/\hbar} dq = \pm \pi i \frac{d}{dq} \frac{(q - q^+) \tilde{F}(q^+) e^{\pm iqs}}{\mp m_i v_{\Phi}''(q^+) (q - q^+)^2 / \hbar} \Big|_{q=q^+} .$$

(VIII.57)

Здесь использовалось разложение в ряд Тейлора знаменателя в окрестности  $q = q^+$ :

$$\begin{aligned} q \mp \frac{2m_i}{\hbar} v_{\Phi}(q) &= q^+ + (q - q^+) \mp \\ &\mp \frac{2m_i}{\hbar} \left[ v_{\Phi}(q^+) + v'_{\Phi}(q^+) (q - q^+) + \frac{1}{2} v''_{\Phi}(q^+) (q - q^+)^2 \right] = \\ &= \mp \frac{m_i}{\hbar} v''_{\Phi}(q^+) (q - q^+)^2 . \end{aligned}$$

Возникает вопрос: какие ограничения на физические свойства системы вносит наличие кратного полюса в интегралах?

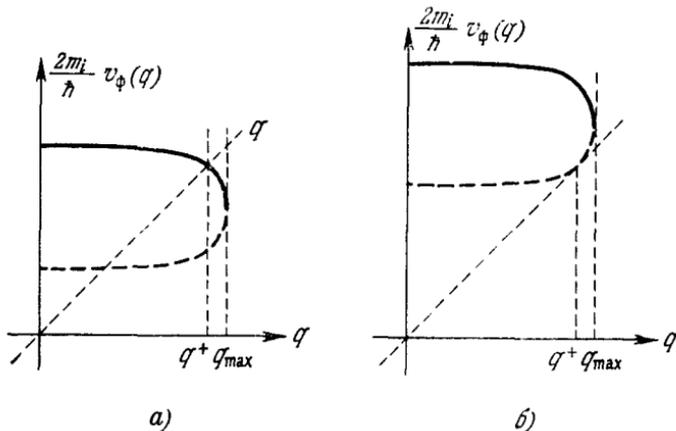


Рис. 16.

Определим для этой цели  $q^+$  из условия касания. Это условие есть

$$1 - \frac{2m_i}{\hbar} v'_{\Phi}(q^+) = 0 .$$

Ввиду того, что  $q^+$  близко к  $q_{\max}$ , определим  $v'_{\Phi}(q^+)$ , аппроксимируя функцию  $I(v)$  вблизи ее максимума ( $v \sim 3$ ), в той ее (левой)

части (рис. 17), которая определяет вторую ветвь дисперсионной кривой (см. рис. 6):

$$I(\nu) = I(\tilde{\nu}) + I'(\tilde{\nu})(\nu - \tilde{\nu}) + 1/2 I''(\tilde{\nu})(\nu - \tilde{\nu})^2 + \dots$$

$$(I(\tilde{\nu}) = 0, \quad I''(\tilde{\nu}) < 0, \quad \tilde{\nu} \equiv 3).$$

Из дисперсионного уравнения (VIII.14) следует

$$-\frac{\theta}{2\rho_0\sigma_{aa}^2(q)} \sigma'_{aa}(q) = I''(\tilde{\nu})(\nu - \tilde{\nu}) \frac{1}{v_T} v'_\Phi(q). \quad (\text{VIII.58})$$

Для относительно высоких температур, когда скорости сближения атомов превышают их энергию связи, можно учитывать только отталкивательные силы взаимодействия между ними. Применяя простейший потенциал отталкивательных сил

$$K_{aa}(s) = \frac{G}{s} e^{-\kappa s},$$

имеем

$$\sigma'_{aa}(q^+) = - \frac{4\pi G}{q^{+2} + \kappa^2} 2q^+. \quad (\text{VIII.59})$$

Учитывая также, что  $\nu = \frac{r_\Phi(q^+)}{v_T} = \frac{\hbar q^+}{2m_i v_T}$ ,  $v'_\Phi(q^+) = \frac{\hbar}{2m_i}$ , находим

$$q^+ = \frac{|I''(\tilde{\nu})| \tilde{\nu} \frac{\hbar}{2m_i v_T}}{\frac{\theta}{4\pi G \rho_0} + |I''(\tilde{\nu})| \left(\frac{\hbar}{2m_i v_T}\right)^2}. \quad (\text{VIII.60})$$

Подставим это значение  $q^+$  в условие существования кратного корня

$$\frac{2m_i}{\hbar} v_\Phi(q_{\max}) > q^+$$

и учтем, что в рассматриваемом случае

$$v_\Phi(q_{\max}) \approx 3v_T.$$

Тогда находим следующее ограничение параметров, выражающее условие наличия кратного корня:

$$\frac{6m_i v_T}{\hbar} > \frac{|I''(\tilde{\nu})| \tilde{\nu} \frac{\hbar}{2m_i v_T}}{\frac{\theta}{4\pi G \rho_0} + |I''(\tilde{\nu})| \left(\frac{\hbar}{2m_i v_T}\right)^2}. \quad (\text{VIII.61})$$

Оно выполняется тем лучше, чем выше температура нейтрального газа и меньше значение его плотности.

Окончательно взаимодействие ион — ион через промежуточную систему для случая низких плотностей и достаточно высоких температур имеет вид

$$K_{ii}(s) = \begin{cases} \frac{\gamma^2}{m_i v_{\Phi}''(q^+)/\hbar} \sin q^+ s - \frac{2\partial\gamma^2/\partial q^+}{m_i v_{\Phi}''(q^+)/\hbar} \frac{\cos q^+ s}{s}, & s > \frac{\pi}{q_{\max}}, \\ \text{const}, & s < \frac{\pi}{q_{\max}}, \end{cases} \quad (\text{VIII.62})$$

где

$$\gamma^2 = \frac{1}{\pi} \frac{(n_a + 1/2) \sigma_{ia}^2(q^+) q^{+2}}{\sigma_{aa}(q^+)}$$

и  $q^+$  удовлетворяет условиям

$$q^+ \mp \frac{2n_i}{\hbar} v_{\Phi}(q^+) = 0,$$

$$1 \mp \frac{2m_i}{\hbar} v'_{\Phi}(q^+) = 0.$$

Оценим порядок величин:

1. Второй член в формуле взаимодействия приблизительно в  $q^+ s$  раз меньше первого члена.

2. Для определения значения  $q^+$  воспользуемся ранее полученным соотношением

$$\min q^+ \approx \frac{4\pi G \rho_0}{\theta} |I''(\tilde{\nu})| \tilde{\nu} \frac{\hbar}{2m_i v_T}.$$

Полагая  $G \sim Z^2 e^2$  ( $Z$  — порядковый номер атомов нейтрального газа),  $T \sim 3 \cdot 10^3$  К, для  $m_i$  — массы атома азота, в условиях атмосферной плотности имеем

$$\min q^+ \approx 1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}.$$

Таким образом, во втором случае характерные пространственные периоды в формуле взаимодействия значительно больше, чем в первом случае высоких плотностей.

3. Учтем, что в рассматриваемом случае

$$\frac{\hbar \omega_{q^+}}{\theta} \ll 1,$$

а значит,

$$n_{q^+} + \frac{1}{2} \approx \frac{\theta}{\hbar \omega_{q^+}} \sim 2 \cdot 10^2.$$

4. Для температур порядка  $3 \cdot 10^3$  °К еще можно пользоваться поляризационным механизмом взаимодействия иона с атомом нейтрального газа и, таким образом, воспользоваться формулой для фурье-образа этого взаимодействия:

$$\sigma_{ia}(q^+) = -4\pi e^2 \beta q^+ \left[ \frac{\sin q^+ a}{(q^+ a)^2} + \frac{\cos q^+ a}{q^+ a} + \text{Si}(q^+ a) \right].$$

В рассматриваемом случае  $q^+ a \ll 1$  и, следовательно,

$$\sigma_{ia}(q^+) \approx -4\pi e^2 a^2, \quad a \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

5. В принятом выше экранированном потенциале отталкивания между атомами, фурье-образ которого есть

$$\sigma_{aa}(q^+) = \frac{4\pi Z^2 e^2}{\kappa^2 + q^{+2}},$$

параметр экранирования  $\kappa \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ ,  $Z \approx 14$ .

В итоге учета численного значения величин с помощью пунктов 1—5, входящих в величину эффективного «заряда»  $\gamma$ , получаем

$$\gamma^2 = e^2 \frac{4a^4 \frac{\theta}{\hbar \omega_{q^+}} \kappa^2 q^{+2}}{Z^2} \approx 5,6 \cdot 10^{-3} e^2.$$

Определим величину взаимодействия

$$K_{ii}(s) = \frac{\gamma^2}{m_i v_{\Phi}''(q^+)/\hbar} \sin q^+ s,$$

задавая расстояние  $s$ .

Полагая для знаменателя по порядку величины

$$\frac{m_i}{\hbar} v_{\Phi}''(q^+) \approx \frac{m_i v_{\Phi}(q^+)}{\hbar q^{+2}}$$

и воспользовавшись условием существования кратного корня

$$\frac{2m_i v_{\Phi}(q^+)}{\hbar} \geq q^+,$$

имеем

$$\frac{m_i v_{\Phi}''(q^+)}{\hbar} \approx \frac{1}{2q^+}.$$

Таким образом, если расстояние  $s$  между ионами удовлетворяет неравенству

$$5,6 \cdot 10^{-3} q^+ s > 1,$$

то взаимодействие через промежуточную систему превышает кулоновское взаимодействие.

Учитывая значение  $q^+$ , получаем для расстояний

$$s > 2 \cdot 10^{-4} \text{ см.}!$$

В заключение этой главы отметим некоторые особенности взаимодействия через промежуточную систему:

1. Значительная величина этого взаимодействия, в сравнении с кулоновским, обосновывает исходное допущение о малости кулоновских сил между ионами, в сравнении со взаимодействиями через промежуточную систему.

2. Характерной чертой этого взаимодействия является пространственная осцилляция потенциала с весьма малым периодом. В теории с непрерывным распределением вероятности местоположения частиц не накладываются каких-либо ограничений на величину пространственных периодов в среде, вопреки классической модели газа, в которой столь малые периоды (меньшие среднего расстояния между атомами газа) являются нереальными.

3. В обоих рассмотренных выше случаях учитывалось только взаимодействие между ионами, а не электронами через промежуточную систему.

Наиболее сильная зависимость от массы частиц определяется фактором

$$q^+ = \frac{2m_i}{\hbar} v_{\Phi},$$

стоящим в числителе выражения для коэффициента  $\gamma^2$ , что приводит к следующим отношениям взаимодействий для рассмотренных выше двух случаев (I и II):

$$\left| \frac{K_{i\dot{b}}}{K_{ee}} \right| \sim \left( \frac{m_i}{m_e} \right)_I^2, \quad \left( \frac{m_i}{m_e} \right)_{II}^3.$$

В следующей главе анализируется роль рассмотренного взаимодействия ионов в проблеме существования и устойчивости плазменных образований, удерживающихся собственными силами, без участия стенок.

ГЛАВА IX

**ТЕОРИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ И УСТОЙЧИВОСТИ  
ПЛАЗМОИДОВ, УДЕРЖИВАЮЩИХСЯ  
СОБСТВЕННЫМИ СИЛАМИ \*)**

---

§ 1. Постановка задачи и метод решения

Решение проблемы существования статистического роя частиц<sup>\*</sup> удерживающегося собственными силами, без участия стенок, открывает возможность объяснения ряда известных наблюдаемых явлений: искусственных и естественных плазмодов, явления страт, атмосферных сферических слоев планет [30 — 32].

При решении указанной задачи методами классической статистики возникает трудность: предположение о конечности массы образования совместно со свойствами квазистационарности, температурности в распределении частиц, изотермичности и дифференцируемости функций, описывающих состояние системы, — приводит к внутреннему противоречию. Действительно, используя распределение Больцмана, имеем для массы каждого сорта частиц

$$M_i = \int_{(\infty)} C_i \exp\left(-\frac{e_i \Phi}{\theta_i}\right) d\mathbf{r} > \int_{\mathbb{R}} C_i \exp\left(\frac{-0}{\theta_i}\right) 4\pi r^2 dr = \infty, \quad (\text{IX.1})$$

где  $\Phi(\mathbf{r})$  — собственный электростатический потенциал системы. Если  $R$  — предполагаемый эффективный радиус, то при  $r > R$   $\Phi(\mathbf{r}) \sim 1/r$ , в результате чего масса каждого сорта расходится.

Аналогично, статистическая механика Гиббса также приводит к расходимости нормировки многомерной функции распределения в бесконечной области: предполагая, что  $K(|\mathbf{s}|)_{|\mathbf{s}| \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ , имеем

$$\int_{(\infty)} \dots \int_{(\infty)} \exp\left[-\frac{1}{\theta} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} K(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)\right] \prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j = \infty.$$

Отказ от изотермичности, без дополнительных условий, не дает замкнутого аппарата. Широко распространенные политропные модели атмосфер сами по себе не приводят к появлению собственных электрических полей, особенно необходимых для процессов ионизации в плазмодах.

В настоящей главе проблема существования роя частиц, удерживающегося собственными силами, связывается с существованием

---

\*) Вопросы этой главы рассмотрены совместно с М. А. Яковлевым.

сил взаимодействия между ионами в неполностью ионизованной плазме посредством обмена фононами, имеющимися в нейтральном газе.

Эффект притяжения между ионами оказывается весьма значительным. Энергия связи ионов достигает величин порядка энергии связи атомов в твердой фазе. Энергия связи выделяется при уменьшении радиуса образования — она оказывается достаточной для поддержания процессов ионизации. Механизм процессов ионизации заключается в образовании собственных неоднородных электростатических полей, являющихся следствием осцилляторного изменения в пространстве потенциала взаимодействия ионов через промежуточную систему.

Для описания системы трех сортов частиц: атомов, электронов и ионов — будем исходить из основных уравнений теории.

1. Для атомов

$$\frac{\partial f_a(r, v, t)}{\partial t} + v \nabla_r f_a - \frac{1}{m_a} \nabla_r [U_{aa} + U_{ai} + U_{ae}] \nabla_v f_a = 0,$$

$$U_{aa}(r) = \int K_{aa}(|r - r'|) f_a dr' dv,$$

$$U_{ai}(r) = \int K_{ai}(|r - r'|) f_i dr' dv, \quad (\text{IX.2})$$

$$U_{ae}(r) = \int K_{ae}(|r - r'|) f_e dr' dv.$$

В условиях холодной плазмы концентрация электронов и ионов на несколько порядков меньше, чем концентрация нейтральных частиц:

$$|f_i| \sim |f_e| \ll f_a,$$

поэтому влиянием заряженных частиц на состояние нейтрального газа в ряде задач можно пренебречь.

2. Для ионов

$$\frac{\partial f_i(r, v, t)}{\partial t} + v \nabla_r f_i - \frac{1}{m_i} \nabla_r (U_{ia} + U_{ii} + \Phi) \nabla_v f_i = 0,$$

$$U_{ia}(r) = \int K_{ia}(|r - r'|) f_a dr' dv, \quad U_{ii}(r) = \int K_{ii}(|r - r'|) f_i dr' dv, \quad (\text{IX.3})$$

$$\Delta \Phi = -4\pi e^2 \int_{(\infty)} (f_i - f_e) dv,$$

где  $K_{ii}(|r - r'|)$  — взаимодействие ионов через промежуточную систему — акустическое поле в нейтральном газе, определенное в VIII главе.

Для определения взаимодействия ионов с фоном нейтральных атомов и акустическим полем подставим в функционал  $U_{ia}(r)$

функцию распределения, описывающую нейтральный газ:

$$f_a = f_{a0}(v^2) + \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad \int_{\infty} f_{a0}(v^2) d\mathbf{v} = \rho_0 = \text{const},$$

$$\int_{(\infty)} \varphi d\mathbf{v} = \delta\rho_t(\mathbf{r}, t) = \sum_q \delta\rho_q e^{-i\omega_q t + i\mathbf{q}\mathbf{r}};$$

находим

$$U_{ia0} = \rho_0 \int_{(\infty)} K_{ia}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = \text{const},$$

$$\delta U_{ia} = \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\rho_t(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (\text{IX.4})$$

Используя переход от суммы к интегралу

$$\sum_q \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int (\dots) dq$$

и вводя фурье-образ энергии взаимодействия ион — атом, приходим к интегралу

$$\delta U_{ia} = \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^{q_{\max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sigma_{ia}(q) \delta\rho_q e^{-i\omega_q t + i\mathbf{q}\mathbf{r} \cos\vartheta} q^2 dq d\varphi \sin\vartheta d\vartheta. \quad (\text{IX.5})$$

Применим к этому интегралу известную теорему теории интегралов Фурье

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \cos \lambda x dx \rightarrow 0,$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \sin \lambda x dx \rightarrow 0.$$

В нашем случае роль параметра  $\lambda$  играет время  $t$ , и, так как  $\omega_q = v_{\Phi} q$ , то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \delta U_{ia}(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0. \quad (\text{IX.6})$$

Таким образом, влияние нейтрального газа на стационарное состояние ионов сказывается только на взаимодействиях их между собой путем обмена фононами нейтрального газа.

3. Для электронов, так же как и для ионов, исходное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f_e - \frac{1}{m_e} \nabla_{\mathbf{r}} (U_{ea} + U_{ee} - \Phi) \nabla_{\mathbf{v}} f_e = 0,$$

$$U_{ea} = \int K_{ea}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_a d\mathbf{r}', \quad U_{ee} = \int K_{ee}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_e d\mathbf{r}', \quad (\text{IX.3}')$$

$$\Delta \Phi = -4\pi e^2 \int_{(\infty)} (f_i - f_e) d\mathbf{v},$$

при этом, аналогично вышеуказанному,

$$U_{ea0} = \rho_{e0} \int K_{ea}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = \text{const}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \delta U_{ea}(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0.$$

Заметим также, что взаимодействие электронов через промежуточную систему мало по сравнению со взаимодействием ионов:

$$K_{ee} \sim \left(\frac{m_e}{m_i}\right)_I^2 K_{ii}, \quad K_{ee} \sim \left(\frac{m_e}{m_i}\right)_{II}^3 K_{ii},$$

соответственно для первого и второго случаев взаимодействий.

Окончательно статистическое описание поведения ионов и электронов в холодной плазме сводится к системе уравнений

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f_i - \frac{1}{m_i} \nabla_r [U_{ii} + \Phi] \nabla_v f_i = 0,$$

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f_e + \frac{1}{m_e} \nabla_r \Phi \nabla_v f_e = 0,$$

$$U_{ii} = \int K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f_i d\mathbf{r}' d\mathbf{v}, \quad \Delta \Phi = -4\pi e^2 \int_{(\infty)} (f_i - f_e) d\mathbf{v} \quad (\text{IX.7})$$

$$(K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)) = \int \langle \mathbf{k}, \mathbf{k} | K_{ii} | \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{q}.$$

Возникает дальнейшая задача: выделить, опираясь на естественные условия, плазмодальные решения этих уравнений, которые описывали бы шаровые скопления частиц, удерживающихся собственными силами.

К естественным дополнительным условиям нужно отнести следующие:

1. Условие стационарности

$$\frac{\partial}{\partial t} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

2. Условие независимости распределений по  $\mathbf{r}$  и  $v^2$ :

$$f_{i,e}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho_{i,e}(\mathbf{r}) w_{i,e}(v^2),$$

$$\int_{(\infty)} w_{i,e}(v^2) d\mathbf{v} = 1.$$

3. Условие шаровой симметрии

$$\rho_{i,e}(\mathbf{r}) = \rho_{i,e}(|\mathbf{r}|).$$

4. Условие квазинейтральности

$$\frac{1}{nd} \int_r^{r+nd} (\rho_i - \rho_e) dr = 0, \quad d = \frac{2\pi}{q^+}, \quad n \geq 1,$$

т. е. объемный заряд (в среднем) вдоль радиуса в плазмоеде должен отсутствовать.

Используя перечисленные условия, получим

$$\begin{pmatrix} \rho_i \\ \rho_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_i \exp\left(-\frac{U + \Phi}{\theta_i}\right) \\ C_e \exp\left(\frac{\Phi}{\theta_e}\right) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} w_i \\ w_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{m_i}{2\pi\theta_i}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{m_i v^2}{2\theta_i}\right) \\ \left(\frac{m_e}{2\pi\theta_e}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2\theta_e}\right) \end{pmatrix}; \quad (\text{IX.8})$$

при этом потенциальные энергии взаимодействия  $\Phi$  и  $U$  должны удовлетворять системе основных нелинейных уравнений

$$\left. \begin{aligned} \Delta\Phi &= -4\pi e^2 \left[ C_i \exp\left(-\frac{U + \Phi}{\theta_i}\right) - C_e \exp\left(\frac{\Phi}{\theta_e}\right) \right], \\ U(\mathbf{r}) &= \int K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) C_i \exp\left[-\frac{U(\mathbf{r}') + \Phi(\mathbf{r}')}{\theta_i}\right] d\mathbf{r}', \\ \frac{q^+}{2\pi n} \int_r^{r+2\pi n/q^+} e(\rho_i - \rho_e) dr &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX.9})$$

где  $K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — энергия взаимодействия ионов через промежуточную систему,  $\Phi$  — электрический коллективный потенциал,  $U$  — коллективный потенциал взаимодействия через промежуточную систему.

В полученной системе уравнений неизвестными являются  $\Phi$ ,  $U$ ,  $C_i$ ,  $C_e$ , но уравнений всего три, однако постоянную  $C_i$  можно задать заранее как степень предварительной ионизации, — тогда три величины,  $\Phi$ ,  $U$ ,  $C_e$ , определяются уравнениями.

Возникает задача нахождения решений, передающих основные черты пространственно-ограниченных плазмоедов, и вопрос об их устойчивости.

## § 2. Существование ионной конденсации.

**Устойчивость по отношению к объемным вариациям плотности**

Поставим следующую задачу: какие видоизменения в состояние плазмы вносит наличие взаимодействия между ионами через акустическое поле нейтральной среды, окружающей ионы?

В этом параграфе будем решать данную задачу в бесконечной области, т. е. достаточно далеко от внешних границ плазмы. На ос-

новании предыдущего параграфа потенциалы  $U(\mathbf{r})$  и  $\Phi(\mathbf{r})$  в стационарном случае удовлетворяют нелинейной системе (IX.9).

Указанные уравнения, при известных условиях, допускают решение в виде пространственно-однородного распределения.

Полагая

$$U = U_0 = \text{const}, \quad \Phi = \Phi_0 = \text{const}, \quad (\text{IX.10})$$

имеем

$$\begin{aligned} C_i \exp\left(-\frac{U_0 + \Phi_0}{\theta_i}\right) \int_{(\infty)} K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' = \\ = C_i \exp\left(-\frac{U_0 + \Phi_0}{\theta_i}\right) \cdot 4\pi \int_0^{\infty} K_{ii}(s) s^2 ds. \end{aligned} \quad (\text{IX.11})$$

В нашем случае

$$K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{\gamma^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cos q^+ |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \quad (\text{IX.12})$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} K_{ii}(s) s^2 ds = \gamma^2 \int_{\pi/q_{\max}}^{\infty} s \cos q^+ s ds = \gamma^2 \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{\pi/q_{\max}}^{\infty} e^{-\alpha s} \cos q^+ s ds = \\ = -\gamma^2 \left( \frac{1}{q^{+2}} \cos q^+ \frac{\pi}{q_{\max}} + \frac{1}{q^+ q_{\max}} \sin q^+ \frac{\pi}{q_{\max}} \right). \end{aligned}$$

Поскольку  $q_{\max} > q^+$  (см. главу VIII), можно использовать приближенное равенство

$$\int_0^{\infty} K_{ii}(s) s^2 ds \approx -\frac{\gamma^2}{q^{+2}}.$$

Для однородных потенциалов  $U_0$  и  $\Phi_0$  получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} U_0 = -\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}} \exp\left(-\frac{U_0 + \Phi_0}{\theta_i}\right), \\ C_i \exp\left(-\frac{U_0 + \Phi_0}{\theta_i}\right) = C_e \exp\left[\frac{\Phi_0}{\theta_e}\right]. \end{aligned} \quad (\text{IX.13})$$

Вследствие нейтральности среды электрический потенциал можно нормировать на нуль ( $\Phi_0 \equiv 0$ ). Вводя обозначения

$$-U_0/\theta_i = \varphi, \quad 4\pi\gamma^2 C_i/q^{+2}\theta_i = \lambda,$$

для определения  $\varphi$  получаем трансцендентное уравнение

$$\varphi = \lambda e^{\varphi}, \quad \lambda > 0, \quad (\text{IX.14})$$

где предполагается, что  $C_i$  как концентрацию ионизации можно

задавать извне. Концентрация электронов определяется решением для  $\varphi$ :

$$C_e = C_i e^\varphi. \quad (\text{IX.15})$$

Уравнение для  $\varphi$  имеет действительное решение, если  $\lambda$  меньше или равно  $1/e$ , причем существуют два действительных решения, одно из которых с приближением  $\lambda$  к критическому значению увеличивается от нуля, другое уменьшается от  $+\infty$ . В точке  $\lambda = 1/e$  оба решения совпадают (рис. 18). Точка касания находится из условия

$$1 = \lambda e^\varphi, \quad (\text{IX.16})$$

что дает совместно с исходным уравнением

$$\varphi = 1, \quad \lambda = 1/e.$$

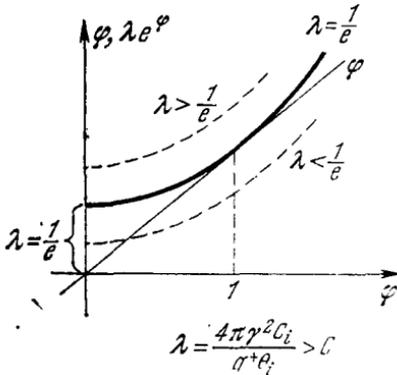


Рис. 18.

Спонтанное образование пространственно-однородного распределения при достижении критических значений макроскопических параметров (температуры и плотности) естественно интерпретировать как ионную конденсацию, к которой приводит учет взаимодействия ионов через промежуточную систему. В отличие от конденсации нейтральных атомов и молекул ионная конденсация возникает не с увеличением и уменьшением температуры, а при условии

$$\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}\theta_i} < \frac{1}{e},$$

т. е. при достаточно больших температурах или малых плотностях.

Исследуем устойчивость конденсированного состояния по отношению к стационарно-пространственным и пространственно-временным возмущениям. Для этой цели произведем линеаризацию системы нелинейных уравнений для потенциалов  $U$  и  $\Phi$ , отправляясь от решения, соответствующего равномерному распределению:

$$U = U_0 + \delta U(\mathbf{r}), \quad \Phi = \Phi_0 + \delta\Phi(\mathbf{r}), \quad \Phi_0 \equiv 0.$$

Ограничиваясь линейными членами, имеем

$$\delta U = \left(-\frac{C_i}{\theta_i}\right) \exp\left(-\frac{U_0}{\theta_i}\right) \int K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) [\delta U(\mathbf{r}') + \delta\Phi(\mathbf{r}')] d\mathbf{r}', \quad (\text{IX.17})$$

$$\delta\delta\Phi = \frac{4\pi e^2 C_i}{\theta_i} \exp\left(-\frac{U_n}{\theta_i}\right) \left[\delta U + \left(1 + \frac{\theta_i}{\theta_e}\right) \delta\Phi\right].$$

Поставим вопрос о существовании у линейной системы решений в виде суперпозиции пространственных гармоник

$$(\delta U, \delta \Phi) = \sum_{\alpha} (\delta U_{\alpha}, \delta \Phi_{\alpha}) e^{ik_{\alpha} r}$$

с действительным значением (значениями) модуля волнового числа. Комплексные значения указывали бы на неустойчивость однородного распределения. Подстановка приводит к дисперсионному соотношению, определяющему  $k_{\alpha} \equiv |k_{\alpha}|$ :

$$1 = -\frac{C_i}{\theta_i} \sigma_{ii}(k_{\alpha}) e^{-U_0/\theta_i} \frac{k_{\alpha}^2 + \frac{\theta_i}{\theta_e} \kappa^2 e^{-U_0/\theta_i}}{k_{\alpha}^2 + (1 + \theta_i/\theta_e) \kappa^2 e^{-U_0/\theta_i}}, \quad (\text{IX.18})$$

где

$$\kappa^2 = 4\pi^2 e^2 C_i / \theta_i, \quad \sigma_{ii}(k_{\alpha}) = 4\pi \int_0^{\infty} K_{ii}(s) \frac{\sin k_{\alpha} s}{k_{\alpha} s} s^2 ds.$$

В нашем случае

$$K_{ii}(s) = \frac{\gamma^2}{s} \cos q^+ s, \quad (\text{IX.19})$$

$$\begin{aligned} -\sigma_{ii}(k_{\alpha}) &= -\frac{4\pi\gamma^2}{2k_{\alpha}} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha s} [\sin(k_{\alpha} - q^+)s + \sin(k_{\alpha} + q^+)s] ds = \\ &= \frac{4\pi\gamma^2}{q^+ - k_{\alpha}^2}. \end{aligned}$$

Присоединяя к дисперсионному соотношению (IX.18) условие существования пространственно-однородного распределения, которое появляется в нулевом приближении относительно амплитуд  $U_0, \Phi_0 \equiv 0$ :

$$0 < \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^+ \theta_i} < \frac{1}{e},$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{q^+ \theta_i}{4\pi\gamma^2 C_i} &= \frac{e^{\Phi_0}}{1 - k_{\alpha}^2 / q^+} \frac{k_{\alpha}^2 + \frac{\theta_i}{\theta_e} \kappa^2 e^{\Phi_0}}{k_{\alpha}^2 + (1 + \theta_i/\theta_e) \kappa^2 e^{\Phi_0}} > e, \\ \Phi_0 &= \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^+ \theta_i} e^{\Phi_0}, \quad \kappa^2 = \frac{4\pi e^2 C_i}{\theta_i}. \end{aligned} \quad (\text{IX.20})$$

Этим соотношениям можно удовлетворить действительным значением  $k_{\alpha} = |k_{\alpha}|$  в интервале от  $|k_{\alpha}| \sim 0$  до  $|k_{\alpha}| \leq q^+$ .

Таким образом:

1. В конденсированном состоянии ионной среды возникают пространственно-периодические решения для потенциалов  $\delta U$  и  $\delta\Phi$  и соответственно для плотности распределения ионов и электронов. Период возникающей структуры стремится к предельному значению  $2\pi/q^+$  с увеличением температуры  $\theta_i$  и уменьшением плотности ионов  $C_i$ . Естественно эти решения интерпретировать как ионную кристаллизацию.

2. Появление ионной кристаллизации указывает на устойчивость исходного распределения, так как вблизи пространственно-однородного состояния хотя и возникает неоднородное, но оно сохраняет однородность в смысле усредненных характеристик по пространственному периоду.

Перейдем к вопросу об устойчивости конденсированной ионной среды по отношению к временным возмущениям. Ограничимся рассмотрением распространения продольных волн с длинами волн, превышающими период структур. В этом случае возможно усреднение плотности и потенциалов по периоду структуры. Дисперсионное уравнение в усредненной среде ионной компоненты (при наличии слабого затухания волн) имеет вид

$$\frac{\theta_i}{2\rho_{0i}\sigma_{ti}(k)} = - \int_0^\infty x e^{-x^2} \cos vx dx, \quad (\text{IX.21})$$

$$v = v_\phi/v_T, \quad v_\phi = \omega/k, \quad v_T = (\theta/2 m_i)^{1/2},$$

в ионной среде

$$\sigma_{ti}(k) = \frac{4\pi q^2}{k^2 - q^{+2}} + \frac{4\pi e^2}{k^2};$$

для длинных волн имеем приближенное решение дисперсионного уравнения

$$\omega^2 = \frac{4\pi\gamma^2\rho_{i0}}{m_i} \frac{k^2}{k^2 - q^{+2}} + \frac{4\pi e^2\rho_{i0}}{m_i} + \frac{3\theta_i}{m_i} + \dots > 0, \quad (\text{IX.22})$$

справедливое, если

$$k^2 < q^{+2} \frac{e^2}{\gamma^2}, \quad \frac{\theta_i}{\rho_{0i}} < \frac{4\pi e^2}{3k^2}.$$

Присоединяя условие ионной конденсации, получаем следующее ограничение на параметры среды, обеспечивающее ее устойчивость:

$$\frac{4\pi\gamma^2}{q^{+2}} < \frac{\theta_i}{\rho_{0i}} < \frac{4\pi e^2}{3k^2},$$

где длины волн ограничены требованием

$$\lambda > \frac{2\pi}{q^+} \sqrt{3} \frac{\gamma}{e} \sim 2 \cdot 10^{-6} \text{ см.}$$

Помимо указанных условий на ионную температуру и конденсацию, требуется, чтобы температура нейтрального газа не превышала некоторой верхней границы для реализации закона сил взаимодействия через промежуточную систему (в первом из двух случаев взаимодействий):

$$\theta_a < \frac{\sigma_{aa}(q^+) \rho_{0a}}{3}, \quad \theta_a \sim \theta_i.$$

Это неравенство указывает на необходимость достаточно высокой плотности нейтрального газа  $\rho_{a0}$ .

Таким образом, в этом параграфе доказано существование ионной конденсации и последующей ионной кристаллизации при достаточно высоких температурах или малых плотностях ионов.

Конденсация возникает только в определенном интервале температур

$$\frac{4\pi\gamma^2\rho_{0i}}{q^{+2}}e < \theta_i < \frac{\sigma_{aa}(q^+) \rho_{0a}}{3}, \quad (\text{IX.23})$$

где

$$\sigma_{aa}(q^+) = 4\pi \int_0^\infty K_{aa}(s) \frac{\sin q^+s}{q^+s} s^2 ds -$$

фурье-компонента атомного взаимодействия и  $\rho_{0i}$ ,  $\rho_{0a}$  — соответственно концентрация ионов и атомов.

Перейдем к анализу существования и устойчивости пространственно-ограниченных плазменных образований, находящихся в условиях ионной конденсации.

### § 3. Определение свойств шарового плазмоида во внутренней области

Приближенный метод, который мы разовьем для указанной цели, будет связан с ограничением — наличием достаточно высоких температур ионного газа:

$$\theta_i > \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}},$$

где постоянная  $C_i$ , характеризующая плотность ионов, связана с постоянной  $\rho_i$  соотношением:

$$\rho_i = C_i e^{-U_0/\theta_i} = C_i e^{4\pi\gamma^2 C_i / q^{+2} \theta_i} > C_i.$$

Здесь мы использовали решение для постоянной составляющей потенциала между ионами (через промежуточную систему), которое получим ниже. Введем малый параметр  $\varepsilon \sim 1/\theta_i$  и будем

искать решение исходных уравнений в виде рядов

$$\begin{aligned} U &= U_0 + \varepsilon U_1 + \varepsilon^2 U_2 + \dots, \\ \Phi &= \varepsilon \Phi_1 + \varepsilon^2 \Phi_2 + \dots, \\ C_e &= C_{e0} + \varepsilon C_{e1} + \varepsilon^2 C_{e2} + \dots \end{aligned} \quad (\text{IX.24})$$

В нулевом приближении получаем

$$\begin{aligned} C_i &= C_{e0}, \quad \Delta \Phi_0 = 0, \\ U_0(r) &= \int K_{ii}(|r - r'|) C_i dr'. \end{aligned} \quad (\text{IX.25})$$

Постоянную электростатического потенциала во внутренней области можно принять равной нулю. Для вычисления появляющегося в (IX.25) интеграла воспользуемся требованием шаровой симметрии.

Введем сферическую систему координат

$$\begin{aligned} dr &= u^2 du \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad s^2 = r^2 + u^2 - 2ur \cos \vartheta, \\ s ds &= ur \sin \vartheta d\vartheta, \quad \sin \vartheta d\vartheta = \frac{s ds}{ur}; \end{aligned}$$

при  $\vartheta = 0$   $s = r - u$ , при  $\vartheta = \pi$   $s = r + u$ .

Тогда

$$U_0(r) = \frac{2\pi}{r} \left[ \int_0^r C_i u du \int_{r-u}^{r+u} K_{ii}(s) s ds + \int_r^R C_i u du \int_{r-u}^{r+u} K_{ii}(s) s ds \right]. \quad (\text{IX.26})$$

Подставляя в полученное выражение коллективного потенциала парное взаимодействие ионов через промежуточную систему, для первого случая этого взаимодействия (см. главу VIII) имеем

$$K_{ii}(s) = \frac{\gamma^2}{1 - 2m_i v_\Phi'(q^+)/\hbar} \frac{\cos q^+ s}{s}, \quad (\text{IX.27})$$

и отделяя постоянные члены от осциллирующих

$$U_0(r) = \bar{U}_0 + \bar{U}_0(r),$$

находим

$$\begin{aligned} \bar{U}_0 &= - \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{[1 - 2m_i v_\Phi'(q^+)/\hbar] q^{+2}}, \\ \bar{U}_0(r) &= \bar{U}_0 \left[ R \sin q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} + O\left(\frac{1}{q^+}\right) \right]; \end{aligned} \quad (\text{IX.28})$$

здесь  $O(1/q^+)$  включает члены, содержащие в знаменателе большое число  $q^+$ . В постоянной составляющей потенциала  $\bar{U}_0$  знаменатель не может обращаться в нуль, так как  $v_\Phi'(q^+) \leq 0$ .

Для второго случая взаимодействия

$$K_{it}(s) = \frac{\gamma^2}{m_i v_{\Phi}''(q^+)/\hbar} \sin q^+ s \quad (\text{IX.29})$$

постоянные члены и осциллирующие слагаемые в выражении потенциала  $U_0(r)$  имеют следующий вид:

$$U_0 = - \frac{8\pi\gamma^2 C_i}{m_i v_{\Phi}''(q^+)/\hbar} \frac{1}{q^+}, \quad (\text{IX.30})$$

$$\bar{U}_0 = \frac{1}{2} U_0 \left[ R \cos q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} + r \sin q^+ r \frac{\cos q^+ r}{r} + O\left(\frac{1}{q^+}\right) \right] q^+ R.$$

В обоих случаях фигурирует энергия связи  $\bar{U}_0$  иона со всем коллективом ионов в объеме шара.

Энергия связи в первом случае (в условиях сильной ионизации  $C_i \approx 2,7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ), принимая ранее вычисленное значение величин<sup>1</sup>

$$\gamma^2 \approx 5,7 \cdot 10^{-15} \text{ эрг} \cdot \text{см}, \quad q^+ \approx 10^9 \text{ см}^{-1},$$

равна

$$|\bar{U}_0|_{\text{I}} \sim 0,1 \text{ эв.}$$

Для второго случая (при той же степени ионизации), учитывая

$$\gamma^2|_{\text{II}} \approx 5,6 \cdot 10^{-3} \text{ э}^2, \quad q^+ \approx 10^4 \text{ см}^{-1},$$

получаем

$$|\bar{U}_0|_{\text{II}} \sim 0,01 \text{ эв.}$$

Столь значительные величины энергии связи вскрывают причину сцепления частиц в плазмоидах, не имеющих аналога среди нейтральных частиц, находящихся в газовой фазе.

Теперь рассмотрим первое приближение. Для первого приближения (по параметру  $\varepsilon$ ) имеем

$$\varepsilon(\rho_i - \rho_e)_1 = C_i - \frac{C_i}{\theta_i} (\bar{U}_0 + \bar{U}_0) - (C_{e0} + \varepsilon C_{e1}). \quad (\text{IX.31})$$

Так как  $C_i = C_{e0}$ , то для среднего значения разности плотностей зарядов получаем

$$\overline{\varepsilon(\rho_i - \rho_e)_1} = - \frac{C_i}{\theta_i} \bar{U}_0 - \varepsilon C_{e1} = 0. \quad (\text{IX.32})$$

Таким образом, постоянная составляющая объемной плотности заряда отсутствует по крайней мере в первом приближении. Отсюда вытекает связь для осциллирующих выражений

$$\overline{\varepsilon(\rho_i - \rho_e)_1} = - \frac{C_i}{\theta_i} \bar{U}_0, \quad (\text{IX.33})$$

а также следующие уравнения для электростатического потенциала:

$$\varepsilon \Delta \Phi_1 = 4\pi e^2 C_i R \sin q^+ R \frac{U_0}{\theta_i} \frac{\sin q^+ r}{r} \quad (\text{IX.34})$$

для первого случая и

$$\varepsilon \Delta \Phi_1 = 4\pi e^2 C_i \frac{U_0}{2\theta_i} \left( R \cos q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} + r \sin q^+ R \frac{\cos q^+ r}{r} \right) q^+ R \quad (\text{IX.35})$$

— для второго.

Для потенциала  $U$  («стороннего» потенциала) в первом приближении имеем

$$\varepsilon U_1 = - \int K_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) C_i \left[ \frac{\bar{U}_0 + \tilde{U}_0(r')}{\theta_i} \right] d\mathbf{r}'. \quad (\text{IX.36})$$

Удерживая главные члены в решении уравнений для электростатического потенциала, получаем

$$\varepsilon \Phi_1 \approx \frac{4\pi e^2 C_i}{q^{+2}} R \sin q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} \frac{U_0}{\theta_i} \quad (\text{IX.37})$$

для первого случая и

$$\varepsilon \Phi_1 \approx \frac{4\pi e^2 C_i}{q^{+2}} \frac{U_0}{2\theta_i} \left( R \cos q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} + r \sin q^+ R \frac{\cos q^+ r}{r} \right) \quad (\text{IX.38})$$

— для второго. Для потенциальной функции взаимодействия через промежуточную систему в первом приближении получаем

$$\varepsilon U_1 = - \frac{\bar{U}_0}{\theta_i} \sigma_{ii}(0) - \frac{\tilde{U}_0}{\theta_i} \sigma_{ii}(q^+), \quad (\text{IX.39})$$

$$\sigma_{ii}(q^+) = 4\pi \int_0^\infty K_{ii}(s) \frac{\sin q^+ s}{q^+ s} s^2 ds$$

и для разности концентраций между ионами и электронами

$$\varepsilon (\rho_i - \rho_e)_I = - C_i R \sin q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} \frac{U_0}{\theta_i}, \quad (\text{IX.40})$$

$$\varepsilon (\rho_i - \rho_e)_{II} = - C_i \left( R \cos q^+ R \frac{\sin q^+ r}{r} + r \sin q^+ R \frac{\cos q^+ r}{r} \right) \frac{U_0}{2\theta_i} q^+ R.$$

Констатируем:

1. Возникновение слоистости в распределении заряда, электростатического и стороннего потенциала с малым периодом и с различием в амплитудах для обоих случаев.

2. Во втором случае, ввиду особого дальнего действия сил, в первом приближении появляется сомножителем большое число  $q^+R \sim 10^7$ . Это накладывает жесткие ограничения на возможности применения разложения по  $\varepsilon$  в сравнении с первым случаем взаимодействия.

Для сильной ионизации рассматриваемое приближение неприменимо. Для первого же случая при концентрации ионов  $C_i \sim \sim 2,7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  критерий малости  $\varepsilon$  приобретает вид

$$\frac{|\bar{U}_0|_{\text{II}}}{\theta_i} < 1;$$

это накладывает условие на значение температур:

$$\theta_i > 0,1 \text{ эв.}$$

Для второго случая имеем

$$\frac{|\bar{U}_0|_{\text{II}}|q^+R}{\theta_i} < 1,$$

при том же значении температуры получаем ограничение на концентрацию ионов:

$$C_i < \frac{1}{3} 10^{12} \text{ см}^{-3}.$$

Перейдем к вопросу о сравнении величин электростатической энергии плазмоида и энергии взаимодействия ионов через промежуточную систему.

Величина электростатической энергии определяется формулой

$$W^E = \frac{1}{2} \int_0^R \varepsilon (\rho_i - \rho_e)_{\text{I}} \cdot \varepsilon \Phi_{\text{I}} \cdot 4\pi r^2 dr, \quad (\text{IX.44})$$

что дает

$$W_{\text{I, II}}^E = 2\pi^2 \left( \frac{eC_i}{q^+ [\dots]_{\text{I, II}}^{1/2}} \right)^2 \frac{U_0|_{\text{I, II}}}{\theta_i} R^3 (q^+R)^2. \quad (\text{IX.44}')$$

Для энергии стороннего поля сил имеем

$$W_{\text{I, II}}^{\bar{U}} = \frac{1}{2} \int_0^R \rho_i U_0 4\pi r^2 dr = -\frac{8\pi}{3} \left( \frac{\gamma C_i}{q^+ [\dots]_{\text{I, II}}^{1/2}} \right)^2 R^3; \quad (\text{IX.42})$$

здесь введено обозначение

$$[\dots]_{\text{I, II}} = 1 - \frac{2m_i v_{\Phi}^{\prime}(q^+)}{\hbar}, \quad \frac{m_i}{\hbar} v_{\Phi}^{\prime\prime}(q^+) q^+.$$

Сравнение величин электростатической и сторонней энергии

приводит к неравенству

$$|W\bar{U}| \gg |W^E|.$$

Зависимость энергии стороннего поля сил от радиуса конфигурации при постоянном числе ионов в плазмойде:

$$N = \frac{4\pi}{3} R^3 C_i = \text{const},$$

$$W_{I, II}^{\bar{U}} = -6\pi \frac{\gamma^2}{q^{+2} [\dots]_{I, II}} N^2 \frac{1}{R^3}, \quad (\text{IX.43})$$

обратно пропорциональна кубу радиуса конфигурации. Таким образом, уменьшение радиуса ведет к выделению внутренней энергии в системе. В этом можно видеть механизм перекачки энергии от его источника к процессам излучения и ионизации в плазмойдах.

Величина полной энергии сил притяжения в плазмойде при  $R \sim 10$  см и прежних значениях коэффициентов  $\gamma^2$ ,  $C_i$ ,  $q^+$  составляет  $\sim 50$  дж.

Таким образом, основной вопрос о природе и величине энергии в естественных плазмойдах решается развиваемой теорией.

#### § 4. Определение состояния плазмойда во внешней области, в окрестности границы

Перейдем к выяснению состояния среды во внешней области, по отношению к плазмойду. Целью рассмотрения является выяснение влияния сильного поля сил притяжения на ионы внешней среды со стороны внутренней области.

Наложим естественные условия на решение соответствующих уравнений во внешней среде.

1. Эта область должна характеризоваться меньшей ионизацией, меньшей температурой и давлением в сравнении с внутренней областью:

$$(\rho', \theta', p')_{i, e} < (\rho, \theta, p)_{i, e}$$

(для всех  $r > R$ ).

2. Во внешней области могут существовать поля скоростей перемещения среды по отношению к внутренней области плазмойда. Количественно характеристики перемещений определяются моментами функций распределения нейтральной и ионной компоненты:

$$u = \int_{(\infty)} v f dv, \quad \mathcal{P}_{\alpha\beta} = \int_{(\infty)} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) f dv.$$

3. Нужно ожидать важную роль сил притяжения, действующих на ионы внешней области, источниками которых являются ионы, расположенные во внутренней области плазмойда.

Поле сил притяжения характеризуется потенциальной функцией

$$U(r) = \frac{2\pi}{r} \int_0^R C_i u du \int_{r-u}^{r+u} K_{ii}(s) s ds, \quad r \geq R.$$

Под влиянием этого поля сил должна возникнуть ионная поляризация в среде, окружающей плазму. Задача теории — уточнить, насколько эта поляризация является существенной в балансе электростатических и сторонних сил.

Исходным уравнением для ионов является

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r f_i - \frac{1}{m_i} \nabla_r (U + \Phi) \nabla_v f_i = 0 \quad (\text{IX.44})$$

и аналогичное для электронов. Переходя от функций распределения к моментам, находим

$$\begin{aligned} \left[ m\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla_r \right) \mathbf{u} + \nabla p - \rho (\gamma \mathbf{E}^U + e \mathbf{E}) \right]_i &= 0, \\ \left[ m\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla_r \right) \mathbf{u} + \nabla p - \rho e \mathbf{E} \right]_e &= 0, \\ \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}_r \rho \mathbf{u} \right]_{i,e} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{IX.45})$$

$$\text{div } e \mathbf{E} = 4\pi e^2 (\rho_i - \rho_e), \quad \gamma \mathbf{E}^U = -\nabla_r (U + U^s), \quad [p - \rho \theta]_{i,e} = 0,$$

$$U = \int K_{ii} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho_i(\mathbf{r}') |_{r \leq R} d\mathbf{r}',$$

$$U^s = \int K_{ii} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho_i(\mathbf{r}') |_{r \geq R} d\mathbf{r}'.$$

В этой системе неизвестными являются  $u_i$ ,  $u_e$ ,  $\rho_i$ ,  $\rho_e$  — всего 8 величин, при этом  $\theta_i$  и  $\theta_e$  должны быть заданы извне. Число уравнений для определения 8 величин — оказывается тоже 8. Три последних соотношения конкретизируют уравнения состояния и напряженности стороннего поля сил, входящих в первые уравнения системы.

Сделаем предположение, оправдывающееся вычислением, что ионная поляризация под влиянием сил притяжения, исходящих из внутренней области конфигурации, велика в сравнении со средним значением концентрации в среде. Это позволяет и во внешней среде ввести малый параметр, характеризующий малую концентрацию электронов в областях значительной ионной поляризации ( $\rho_e \rightarrow \varepsilon \rho_e$ ), и положить

$$\begin{aligned} \rho_i &= \rho_{i0} + \varepsilon \rho_{i1} + \varepsilon^2 \rho_{i2} + \dots, \\ \rho_e &= \varepsilon \rho_{e1} + \varepsilon^2 \rho_{e2} + \dots, \\ E_r^U &= E_{r0}^U + \varepsilon E_{r1}^U + \varepsilon^2 E_{r2}^U + \dots \end{aligned} \quad (\text{IX.46})$$

В первом приближении получаем

$$\begin{aligned}
 m_i \rho_{i0} \left( \frac{\partial}{\partial t} + u \nabla_r \right) u + \nabla_r p - \rho_{i0} (\gamma E_0^U + e E_0), \\
 \operatorname{div} e E_0 = 4\pi e^2 \rho_{i0}, \quad \gamma E_{r0}^U = -\frac{\partial}{\partial r} (U + U^s), \\
 U(r) = \frac{2\pi}{r} \int_0^R C_i u \, du \int_{r-u}^{r+u} K_{ii}(s) s \, ds, \\
 U^s = \int K_{ii}(|r - r'|) \rho_{i0}(r') \, dr'.
 \end{aligned} \tag{IX.47}$$

Будем рассматривать решение этой системы в частном случае: 1) слабых потоков перемещений во внешней среде; 2) слабых градиентов давления, за счет меньших температур ионов во внешней среде; 3) малости самовоздействия ионов в областях ионной поляризации, обусловленной малой толщиной поляризационного слоя, в котором перестают действовать сторонние силы.

Последнее ограничение должно быть оправдано вычислением толщины слоя поляризации ионной компоненты. При соблюдении этих условий уравнения для внешней области сводятся к следующим:

$$\begin{aligned}
 \gamma E_{r0}^U + e E_{r0} = 0, \\
 \operatorname{div} e E_0 = 4\pi e^2 \rho_{i0}, \quad -\frac{\partial U}{\partial r} = \gamma E_{r0}^U, \\
 U = \frac{2\pi}{r} \int_0^R C_i u \, du \int_{r-u}^{r+u} K_{ii}(s) s \, ds.
 \end{aligned} \tag{IX.48}$$

Полученная система дает возможность определить:

- а) поле сил притяжения во внешней среде,
- б) напряженность электрического поля,
- в) концентрацию и плотность заряда в областях ионной поляризации.

Рассмотрим стороннюю потенциальную функцию и соответствующую ей напряженность сил притяжения во внешней среде; имеем

$$U(r)|_I = -\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2} [1 - 2m_i v_\phi'(q^+)/\hbar]} \left[ \frac{\cos q^+ r}{r} R \cos q^+ R + O\left(\frac{1}{q^+}\right) \right], \tag{IX.49}$$

$$\begin{aligned}
 U(r)|_{II} = \\
 = -\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2} [m_i v_\phi''(q^+)/\hbar]} \frac{1}{q^+} \left[ \left( \frac{\cos q^+ r}{r} R \sin q^+ R + \sin q^+ r \cdot \cos q^+ R \right) q^+ R + \right. \\
 \left. + 3 \frac{\cos q^+ r}{r} \cos q^+ R - \sin q^+ r \sin q^+ R + O\left(\frac{1}{q^+}\right) \right].
 \end{aligned}$$

Напряженности полей сил притяжения усредним по различным значениям радиуса конфигурации в интервале, большем характерного периода  $2\pi/q^+$ ; в результате получим

$$\overline{\gamma E_{r0}^U}|_I^R = -\frac{\partial U^R}{\partial r} = -\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2} [1 - 2m_i v_{\Phi}^r(q^+)/\hbar]} \left( \frac{1}{2} q^+ \sin \delta q^+ \right), \quad (\text{IX.50})$$

$$\begin{aligned} \overline{\gamma E_{r0}^U}|_{II}^R &= -\frac{\partial U^R}{\partial r} = \\ &= -\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2} [m_i v_{\Phi}^r(q^+)/\hbar]} \frac{1}{q^+} \left( \frac{3}{2} q^+ \sin q^+ \delta + \frac{1}{2} q^+ \cos q^+ \delta \right), \end{aligned}$$

где положено  $r = R + \delta$ .

Замечаем, что в обоих случаях напряженности полей сил притяжения, действующих на ионы, направлены вглубь конфигурации (рис. 19) и поэтому приводят к «захвату» ионов из внешней среды к границе конфигурации.

Напряженности поля не изменяют своего направления в интервале значений толщины слоя  $\delta$ ,  $q^+ \delta \ll \pi$ . Эта толщина слоя оказывается весьма малой:  $\delta|_I \sim \pi \cdot 10^{-9}$  см,  $\delta|_{II} \sim \pi \cdot 10^{-6}$  см, что, однако, является допустимым в нелокальной теории.

Заметим, что приведенные выше расчеты не учитывали члена самовоздействия  $U^s$ , обусловленного «захваченными» ионами. Основанием этого является малая толщина области поляризации  $\delta$ .

Ранее мы видели, что силы взаимодействия через промежуточную систему исчезают на малых расстояниях  $s < \pi/q_{\max}$ ;  $U^s$  можно не учитывать при условии  $q^+ \lesssim q_{\max}$ .

Перейдем к рассмотрению важного свойства среды в окрестности конфигурации — наличия аномально высокой плотности ионов и ионного заряда на границе плазмоида.

Из соотношений (IX.48), (IX.49), где выбрано  $r = R + \delta$ , следует

$$\rho_i|_I = \frac{\gamma^2 C_i}{e^2 [1 - 2m_i v_{\Phi}^r(q^+)/\hbar]} \frac{1}{2} [\cos q^+ \delta + \cos (2q^+ R + q^+ \delta)], \quad (\text{IX.51})$$

$$\begin{aligned} \rho_i|_{II} &= \frac{\gamma^2 C_i}{e^2 [m_i v_{\Phi}^r(q^+)/\hbar]} \frac{1}{q^+} \left[ -\cos q^+ (R + \delta) \sin q^+ R \cdot R - \right. \\ &\quad \left. - \sin q^+ (R + \delta) \cdot \cos q^+ R - 3 \frac{R}{r} \cos q^+ (R + \delta) \cos q^+ R + \right. \\ &\quad \left. + \sin q^+ (R + \delta) \sin q^+ R \right]. \end{aligned}$$

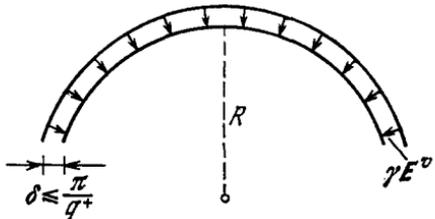


Рис. 19.

Для значений плотностей  $\rho_i |_{\text{I}}$  и  $\rho_i |_{\text{II}}$  ионов, после усреднения по радиусу  $R$  конфигурации, получаем

$$\begin{aligned} \overline{\rho_i |_{\text{I}}}^R &= \frac{\gamma^2 C_i}{e^2 [1 - 2m_i v'_\Phi(q^+)/\hbar]} \frac{1}{2} \cos q^+ \delta, \\ \overline{\rho_i |_{\text{II}}}^R &= \frac{\gamma^2 C_i}{e^2 [m_i v''_\Phi(q^+)/\hbar] q^+} \cos q^+ \delta. \end{aligned} \quad (\text{IX.52})$$

Относительное уплотнение ионов по отношению к концентрации их внутри конфигурации  $C_i$  для первого случая увеличивается приблизительно в  $\gamma^2/e^2 \sim 10^4$  раз.

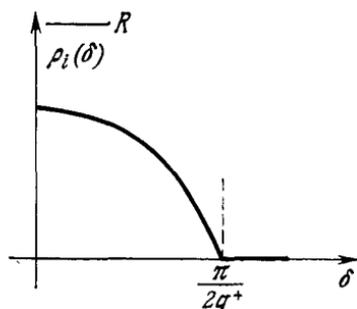


Рис. 20.

Плотности вероятности местоположения ионов не могут быть отрицательными величинами, поэтому, рассматривая их как функции расстояния  $\delta$ , отсчитываемого от границы конфигурации, мы должны ограничиться максимальным значением интервала  $\delta$ , внутри которого эти плотности положительны, т. е. величиной  $\delta_{\text{max}} = \pi/2q^+$  (рис. 20). Поскольку толщина слоев с аномально высокой плотностью ионов мала, введем понятие поверхностной плотности  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} \left( \begin{array}{c} \sigma_i |_{\text{I}} \\ \sigma_i |_{\text{II}} \end{array} \right) &= \int_0^{\pi/2q^+} \left( \begin{array}{c} \rho_i |_{\text{I}} \\ \rho_i |_{\text{II}} \end{array} \right) d\delta = \\ &= \frac{\gamma^2 C_i}{e^2} \left\{ \frac{1}{2q^+} \frac{1}{1 - 2m_i v'_\Phi(q^+)/\hbar}, \frac{1}{q^{+2}} \frac{1}{m_i v''_\Phi(q^+)/\hbar} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{IX.53})$$

Напряженность электрического поля, создаваемая поверхностным слоем ионного заряда, и сила, действующая на единицу поверхности слоя, равны

$$E_{r0} = 4\pi e \sigma_i, \quad F_{r0} = e \sigma_i E_{r0} / 2 = 2\pi (e \sigma_i)^2.$$

От локального уравнения, описывающего состояние ионной среды,

$$\left[ m\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + u \nabla_r \right) u + \nabla_r p - \rho (\gamma E^U + eE) \right]_i = 0, \quad (\text{IX.54})$$

справедливого в каждой точке ионного слоя и вне его, нужно отличать интегральное условие равновесия на поверхности, ограничивающей конфигурацию.

Интегрируя почленно локальное уравнение по толщине слоя высокого уплотнения ионов, имеем

$$\int_{\bar{R}}^{R+\delta} \nabla_r p \, d\delta = p' - p, \quad \int_{\bar{R}}^{R+\delta} e E_0 \rho \, d\sigma = e \frac{E_0 + E'_0}{2} \sigma_i, \quad (IX.55)$$

$$\int_{\bar{R}}^{R+\delta} \gamma E_0^U \rho \, d\delta = \gamma E_0^U \sigma_i,$$

где  $\sigma_i$  — поверхностная плотность ионов:

$$\sigma_i = \lim_{h \rightarrow 0} (\rho h), \quad \rho \sim \frac{1}{h}.$$

При переходе к интегральному условию инерциальные члены мы опустили, вследствие стационарного состояния конфигурации.

Ввиду малой толщины слоя  $s < \pi/q_{\max}$ , собственное поле сторонних сил, создаваемое слоем, исчезает, так как в этом случае

$$K_{ii}(s) = \text{const.}$$

При указанных предпосылках граничное условие на поверхности плазмоида принимает вид

$$p' - p = \sigma_i \gamma E_{r0}^U + \frac{E_{r0} + E'_{r0}}{2} e \sigma_i. \quad (IX.56)$$

Присоединяя полученное выше условие локального равновесия между  $E_{r0}^U$  и  $E_{r0}$  (IX.48) и выражения для  $E_{r0}$ ,  $E'_{r0}$  в случае шаровой конфигурации:  $E_{r0} = 0$ ,  $E'_{r0} = 4\pi e \sigma_i$ , граничное условие можно записать так:

$$p' - p = -4\pi (e\sigma_i)^2 + 2\pi (e\sigma_i)^2 = -\frac{E_{r0}^2}{8\pi} < 0. \quad (IX.57)$$

Таким образом, притяжение слоя внутренней областью конфигурации

$$\gamma E_{r0}^U \sigma_i = -4\pi (e\sigma_i)^2$$

превышает отталкивательные электростатические силы в поверхностном слое

$$\frac{E_{r0} + E'_{r0}}{2} e \sigma_i = 2\pi (e\sigma_i)^2$$

на величину плотности электростатической энергии на поверхности слоя. В результате условие равновесия компенсирует это различие перепадом давления. Давление внутри конфигурации превышает внешнее давление на величину  $E_{r0}^2/8\pi$ . Для использо-

ванных выше значений перепад давления может составлять величину порядка 10 атм.

Перейдем к рассмотрению состояния электронной компоненты вне плазмоида.

Пренебрегаем средними значениями скоростей и ускорений перемещения электронов относительно конфигурации, подобно перемещениям нейтральных частиц, т. е. членами

$$m_e \rho_e \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_e \nabla_r \right) \mathbf{u}_e.$$

На достаточно большом расстоянии от области поляризации ионной и электронной компоненты плазму, окружающую плазмойд, будем считать нейтральной:

$$\rho_e = \rho_i = \rho(0) = \text{const.}$$

Воспользуемся уравнением состояния для электронного газа в форме

$$\rho_e = \theta_e \rho_e.$$

Тогда исходное уравнение для электронов принимает вид

$$\begin{aligned} \theta_e \nabla \rho_e + \rho_e e \mathbf{E}_0 &= 0 & (IX.58) \\ (\text{div } e \mathbf{E}_0 = 4\pi e^2 (\rho_i - \rho_e)). & \end{aligned}$$

Отсюда в линейном приближении получаем

$$\theta_e \Delta (\rho_e - \rho(0)) + 4\pi e^2 \rho(0) (\rho_e - \rho(0)) = 0, \quad (IX.59)$$

что совпадает с уравнением дебаевской поляризации электронного газа при наличии положительного фона.

Сферически-симметричное решение этого уравнения есть

$$\rho_e(r) - \rho(0) = \frac{A}{r} e^{-\kappa r}, \quad \kappa^2 = \frac{4\pi e^2 \rho(0)}{\theta_e}.$$

Если  $\rho(0) \sim 2,7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $T_e \sim 300 \text{ }^\circ\text{K}$ , то толщина области электронной поляризации  $\lambda_D$  составляет  $\sim 10^{-5} \text{ см}$ .

Дебаевская поляризация вокруг ионного слоя уплотненной концентрации создает двойной электрический слой. Электростатическая энергия внутри двойного слоя равна

$$W_D = \left( \frac{E_{r0}^2}{8\pi} \right)^2 \lambda_D 4\pi R^2 = \frac{\pi^2}{2} \frac{\gamma^4 C_i^2}{e^2 [1 - 2m_i v_\Phi'(q^+)/\hbar]^2 q^{+2}} R^2 \lambda_D$$

и аналогично — для второго из рассмотренных выше случаев взаимодействия.

Резервуаром энергий в плазмойде является поле взаимодействия через промежуточную систему

$$W^U = \left| -\frac{8\pi}{3} \frac{\gamma^2 C_i^2}{q^{+2} [1 - 2m_i v_\Phi'(q^+)/\hbar]} \right| R^3,$$

одним из проявлений которого является наличие ионного слоя и электростатической энергии внутри двойного слоя.

Необходимо существование неравенства  $W^U > W_D$ , что приводит к условию, накладываемому на величину радиуса конфигурации:

$$\begin{aligned} R_{\text{I}} &> \frac{3\pi}{16} \frac{\gamma^2}{e^2 [1 - 2m_i v_\Phi'(q^+)/\hbar]} \lambda_D, \\ R_{\text{II}} &> \frac{3\pi}{8} \frac{\gamma^2}{e^2 [m_i v_\Phi''(q^+)/\hbar]} \lambda_D. \end{aligned} \quad (\text{IX.60})$$

Используя ранее введенные оценки коэффициентов, получаем (в обоих случаях взаимодействий)  $R \geq 1$  см.

Перейдем к выяснению возможности ионизации атомов внутри слоя дебаевской поляризации электронами, прошедшими разность потенциалов внутри этого слоя, для чего необходимо

$$eE_{r0}\lambda_D \approx \frac{2\pi\gamma^2 C_i}{q^+} \lambda_D \geq w,$$

где  $w$  — энергия ионизации атома,  $E_{r0}$  — напряженность электростатического поля на поверхности уплотненного слоя ионов.

Полагая  $\lambda_D \sim 10^{-5}$  см,  $\gamma^2 \sim 5,7 \cdot 10^{-15}$  эрг·см в условиях атмосферы и  $C_i \sim 2,7 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, получаем  $eE_{r0}\lambda_D \sim 20$  эв. Для атомов азота  $w \sim 15$  эв.

Таким образом, в рассматриваемой модели плазмоида имеется фактор, ведущий к самоподдерживанию процессов ионизации и возбуждения атомов.

## § 5. Устойчивость конфигурации по отношению к изменению формы ее поверхности

Устойчивость ионной среды по отношению к объемным возмущениям анализировалась в § 2. Устойчивость шаровой конфигурации по отношению к малым изменениям формы, ограничивающей поверхности, будем рассматривать, допуская:

1) возможность использования аппарата первых моментов от функции распределения ионов

$$\begin{aligned} \rho(r, t) &= \int_{(\infty)} f(r, v, t) dv, & \rho(r, t) u(r, t) &= \int_{(\infty)} v f(r, v, t) dv, \\ \mathcal{P}_{\lambda\mu} &= \int_{(\infty)} (v_\lambda - u_\lambda)(v_\mu - u_\mu) f dv = p\delta_{\lambda\mu}; \end{aligned}$$

2) исключение объемных деформаций плотности

$$\rho(r, t) = \rho_0(r) + \delta\rho(r, t), \quad \delta\rho(r, t) \equiv 0$$

не только далеко от поверхности, но и вблизи нее.

Это предполагает следующее:

$$(\rho_0 + \delta\rho) \delta u \approx \rho_0 \delta u, \quad (\rho_0 + \delta\rho) \delta E \approx \rho_0 \delta E,$$

$$E_{r0}^U \delta\rho \ll \rho_0 \delta E_{r0}^U, \quad \rho_0 \delta\rho \ll \rho_0 \delta\rho,$$

где  $\delta u$ ,  $\delta E$ ,  $\delta E_{r0}^U$ ,  $\delta\rho$  — характерные величины, зависящие от деформации поверхности;

3) плавные изменения величин, вызываемые деформацией поверхности, в сравнении с пространственным периодом  $2\pi/q^+$  стационарного состояния:

$$\frac{\partial \delta u_\alpha}{\delta u_\alpha \partial x_\beta} \ll q^+, \quad \frac{\partial \delta E_\alpha^U}{\delta E_\alpha^U \partial x_\beta} \ll q^+, \quad \frac{\partial \delta E_\alpha}{\delta E_\alpha \partial x_\beta} \ll q^+, \quad \frac{\partial \delta\rho}{\delta\rho \partial x_\beta} \ll q^+.$$

В этом случае возможно усреднение невозмущенного состояния по пространственному периоду  $2\pi/q^+$ , так что

$$\langle \rho_0(r) \rangle = \rho_0 = \text{const};$$

4) допустим также, что собственным полем сторонних сил, вызванным поверхностным слоем, можно пренебречь. В стационарном состоянии собственное поле частиц внутри слоя повышенной плотности отсутствует ввиду малой толщины слоя  $\delta_{\text{max}} = \pi/2q^+$  (см. § 2 главы IX). Наличие деформаций с радиусом кривизны на поверхности, превышающим толщину слоя, не может вызвать изменения этого факта.

Поверхностную плотность ионов, которая характеризует уплотненный слой, при наличии деформации можно представить в виде

$$\sigma_i = \sigma_{i0} + \delta\sigma_n e^{i\omega n t}. \quad (\text{IX.61})$$

Соответствующий электростатический потенциал удовлетворяет уравнению Лапласа вне и внутри конфигурации

$$\Delta \delta\Phi = 0;$$

решение его для внешней и внутренней области таково:

$$\delta\Phi'_n = \epsilon'_n r^{-(n+1)} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta), \quad r \geq R,$$

$$\delta\Phi_n = \epsilon_n r^n \mathcal{P}_n(\cos \vartheta), \quad r \leq R, \quad (\text{IX.62})$$

где  $\mathcal{P}_n(\cos \vartheta)$  — функция Лежандра, при этом потенциал непрерывен при переходе через деформированную поверхность:

$$\delta\Phi'_n|_{R+0} = \delta\Phi_n|_{R+0}.$$

Возмущенные значения электростатических полей вне конфигурации имеют вид

$$\delta E'_{nr} = - \left( \frac{\partial}{\partial r} \delta\Phi'_n \right)_R = \epsilon'_n R^{-(n+2)} (n+2) \mathcal{P}_n(\cos \vartheta),$$

$$\delta E'_{n\vartheta} = - \left( \frac{\partial}{r \partial \vartheta} \delta\Phi'_n \right)_R = \epsilon'_n R^{-(n+2)} \mathcal{P}_n^{(1)}(\cos \vartheta). \quad (\text{IX.63})$$

Здесь

$$\mathcal{P}_n^{(1)}(\cos \vartheta) = - \frac{\partial \mathcal{P}_n(\cos \vartheta)}{\partial \vartheta},$$

и аналогично для внутренней области

$$\begin{aligned} \delta E_{nr} &= - \varepsilon_n n R^{n-1} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta), \\ \delta E_{n\vartheta} &= \varepsilon_n R^{n-1} \mathcal{P}_n^{(1)}(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (\text{IX.64})$$

Баланс всех сил выражает условие равновесия деформированной заряженной поверхности; к нему необходимо присоединить кинематическое уравнение для изменения со временем формы самой поверхности [40] и уравнение поверхностной дивергенции электрического поля:

$$m \gamma \sigma_i E_{r0}^U + e \sigma_i \frac{E_0 - E'_0}{2} + m p = m p', \quad \frac{dm}{dt} = [m [m \nabla_r (m \mathbf{v})]], \quad (\text{IX.65})$$

$$m (E' - E) = 4\pi e \sigma_i.$$

Здесь  $m$  — единичная нормаль к деформированной поверхности,  $\mathbf{v}$  — скорость перемещения точек поверхности,  $m \sigma_i \gamma E_{r0}^U$  — поверхностная сила, создаваемая полем сторонних сил от источников, находящихся внутри конфигурации.

В балансе сил мы опустили инерционный член  $m_i \sigma_i d\mathbf{v}/dt$ , ввиду его малости по сравнению с другими членами, что оправдывается последующими результатами.

В равновесии (при отсутствии деформаций) вектор  $m$  направлен вдоль радиуса ( $\mathbf{v} \equiv 0$ ); учитывая, что при этом  $E = 0$ , имеем:

$$p'_0 - p = \sigma_{i0} \gamma E_{r0}^U + \frac{1}{2} e \sigma_{i0} E'_{r0},$$

$$E'_{r0} = 4\pi e \sigma_{i0}.$$

Присоединив сюда выражение для  $\gamma E_{r0}^U$

$$\gamma E_{r0}^U = - 4\pi e^2 \sigma_{i0}, \quad (\text{IX.48}')$$

получаем

$$p'_0 - p_0 = - 2\pi (e \sigma_{i0})^2 = - \frac{1}{8\pi} E_{r0}^2,$$

что совпадает с условием равновесия недеформированной шаровой поверхности.

При наличии деформаций для получения решения векторного уравнения

$$\frac{dm}{dt} = [m [m \nabla (m \mathbf{v})]] \quad (\text{IX.66})$$

полагаем

$$m = m_0 + \delta m_n e^{i\omega n t}, \quad (\text{IX.67})$$

где  $m_0$  имеет компоненты по осям  $r, \vartheta, \alpha$ :

$$m_0 = (1, 0, 0).$$

Тогда

$$\begin{aligned} [m \nabla [m v]] &= \left[ 0 \cdot m_r, 0 \cdot m_\vartheta, \frac{\partial v_r}{r \partial \vartheta} m_\alpha \right], \\ [m [m \nabla [m v]]] &= \left[ 0 \cdot m_r, -\frac{\partial v_r}{r \partial \vartheta} m_\vartheta, 0 \cdot m_\alpha \right]. \end{aligned}$$

Если учесть, что

$$\left( \frac{dm}{dt} \right)_\vartheta = i\omega_n \delta m_n \vartheta,$$

решение для  $\delta m$  принимает вид

$$\begin{aligned} \delta m_{nr} &= 0, \quad \delta m_{n\alpha} = 0, \\ \delta m_{n\vartheta} &= \left( -\frac{1}{i\omega_n r} \frac{\partial v_r}{\partial \vartheta} \right)_{r=R}. \end{aligned} \quad (\text{IX.68})$$

Допустим, что изменение радиуса при деформациях описывается шаровой гармоникой

$$\delta r = -\alpha_n r^{n-1} n \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) e^{i\omega n t},$$

тогда радиальная компонента скорости есть

$$v_r = -\alpha_n i\omega_n n r^{n-1} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) e^{i\omega n t},$$

и, следовательно, компонента  $\delta m_{n\vartheta}$  такова:

$$\delta m_{n\vartheta} = -\alpha_n n R^{n-2} \mathcal{P}_n^{(1)}(\cos \vartheta). \quad (\text{IX.69})$$

В итоге уравнения для возмущенных значений напряженности полей, величин давлений и изменения проекций единичного вектора  $m$  приобретают следующий вид:

$$\begin{aligned} \gamma E_{r0}^U \delta \sigma_n + e \sigma_{i0} \frac{\delta E_{nr} + \delta E'_{nr}}{2} + \frac{1}{2} E'_{r0} e \delta \sigma_n &= \delta p'_n - \delta p_n, \\ \gamma E_{r0}^U \sigma_{i0} \delta m_{n\vartheta} + e \sigma_{i0} \frac{\delta E_{n\vartheta} + \delta E'_{n\vartheta}}{2} &= (p'_0 - p_0) \delta m_{n\vartheta}, \end{aligned} \quad (\text{IX.70})$$

$$\delta m_{n\vartheta} = -\alpha_n n R^{n-1} \mathcal{P}_n^{(1)}(\cos \vartheta), \quad \delta E'_{nr} - \delta E_{nr} = 4\pi e \delta \sigma_n.$$

Эти уравнения и должны определить устойчивость или неустойчивость конфигурации, по отношению к поверхностным деформациям. Из первого и последнего уравнения системы, учитывая (IX.48'),

получаем

$$\varepsilon\sigma_{10} \delta E_{nr} = \delta p'_n - \delta p_n.$$

Выразим разности давлений, обусловленных деформацией, через амплитуды шаровых гармоник.

Возникшее изменение давления  $\delta p_n$  от наличия деформации поверхностного слоя передается в окрестные точки конфигурации.

Ранее мы исходили из приближения, что в окрестности границы конфигурации можно пренебречь сжимаемостью среды при описании поверхностных возмущений. В этом приближении изменение объемных электрических и сторонних сил не имеет места, поэтому появление давления  $\delta p_n$  в точках, близких к поверхности, может компенсироваться только инерционными силами:

$$m\rho \frac{\partial \delta \varphi_n}{\partial t} = \delta p_n, \quad \Delta \delta \varphi_n = 0, \quad r < R,$$

$$m\rho' \frac{\partial \delta \varphi'_n}{\partial t} = \delta p'_n, \quad \Delta \varphi'_n = 0, \quad r > R,$$

где  $m\rho$  и  $m\rho'$  — материальные плотности сред,  $\delta \varphi_n$  и  $\delta \varphi'_n$  — потенциалы скоростей перемещения, которые на основании предыдущего выражаются так:

$$\begin{aligned} \delta \varphi_n &= \alpha_n i \omega_n r^n \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) e^{i\omega_n t}, \\ \delta \varphi'_n &= \alpha'_n i \omega_n r^{-(n+1)} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) e^{i\omega_n t}. \end{aligned}$$

Условие непрерывности нормальных компонент скорости при переходе через границу раздела

$$\left. \frac{\partial \delta \varphi_n}{\partial r} \right|_{R-0} = \left. \frac{\partial \delta \varphi'_n}{\partial r} \right|_{R+0}$$

приводит к связи между коэффициентами  $\alpha_n$  и  $\alpha'_n$

$$\alpha'_n = -\alpha_n \frac{n}{n+1} R^{2n+1}.$$

Учитывая связь изменения потенциалов скоростей с изменением давления, получаем

$$\begin{aligned} \delta p_n &= -m\rho \alpha_n \omega_n^2 R^n \mathcal{P}_n(\cos \vartheta), \\ \delta p'_n &= -m\rho' \alpha'_n \omega_n^2 R^{-(n+1)} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Возвратимся теперь к полученному выше критерию устойчивости

$$\sigma_{10} \delta E_{nr} = \delta p'_n - \delta p_n$$

и учтем, что

$$\delta E_{nr} = -\varepsilon_n n R^{n-1} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta);$$

тогда имеем

$$-\varepsilon_n e \sigma_{i0} n R^{n-1} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) = \alpha_n \frac{\omega_n^2 R^n}{n+1} [n m \rho' + (n+1) m \rho] \mathcal{P}_n(\cos \vartheta).$$

Это соотношение позволяет определить знак квадрата частоты поверхностных колебаний. Для определения знака необходимо знать соотношение между амплитудами  $\varepsilon_n$  и  $\alpha_n$ . Будем исходить из полученного выше выражения для  $\vartheta$ -компонент

$$\sigma_{i0} \gamma E_{r0}^U \delta m_{n\vartheta} + e \sigma_{i0} \frac{\delta E_{n\vartheta} + \delta E'_{n\vartheta}}{2} = (p'_0 - p_0) \delta m_{n\vartheta}.$$

Используя соотношения

$$\gamma E_{r0}^U = -4\pi e^2 \sigma_{i0}, \quad p'_0 - p_0 = -2\pi (e \sigma_{i0})^2,$$

получаем

$$e \sigma_{i0} \frac{\delta E_{n\vartheta} + \delta E'_{n\vartheta}}{2} = 2\pi e^2 \sigma_{i0}^2 \delta m_{n\vartheta}.$$

Привлекая выражения для величин  $\delta E_{n\vartheta}$ ,  $\delta E'_{n\vartheta}$ ,  $\delta m_{n\vartheta}$  и связь между коэффициентами  $\varepsilon_n$  и  $\varepsilon'_n$

$$\varepsilon'_n = \varepsilon_n R^{2n+1},$$

которая получается из непрерывности электростатических потенциалов  $\delta\psi_n$  и  $\delta\psi'_n$ , находим

$$\varepsilon_n = -\alpha_n \frac{2\pi e \sigma_{i0} n}{R}.$$

Это соотношение позволяет оценить роль инерционных членов, которыми мы выше пренебрегли. Сравнение с электрическими силами дает

$$\frac{m \sigma_{i0} dv_r/dt}{e \sigma_{i0} \delta E_{nr}} = \frac{m \omega_n^2}{e} \frac{\alpha_n}{\varepsilon_n} = m \omega^2 \frac{R}{2\pi e^2 \sigma_{i0} n}.$$

Используя полученное значение частоты, имеем

$$\frac{m \sigma_{i0} dv_r/dt}{e \sigma_{i0} \delta E_{nr}} = \frac{1}{4} \frac{h(n+1)}{R} \ll 1,$$

где  $h$  — толщина поверхностного слоя:  $\sigma_{i0}/\rho_{i0} = h$ .

Воспользуемся связью между  $\varepsilon_n$  и  $\alpha_n$ :

$$-\varepsilon_n e \sigma_{i0} n R^{n-1} \mathcal{P}_n(\cos \vartheta) = \alpha_n \frac{\omega_n^2 R^n}{n+1} [m \rho' n + m \rho (n+1)] \mathcal{P}_n(\cos \vartheta);$$

тогда приходим к дисперсионному соотношению для поверхностных колебаний

$$\omega_n^2 = \frac{E^2}{8\pi} \frac{n^2(n+1)}{R^2[m \rho' n + m \rho (n+1)]}. \quad (\text{IX.71})$$

Оно указывает на абсолютную устойчивость рассматриваемой конфигурации по отношению к изменению ее формы, так как при любом значении номера  $n \geq 1$   $\omega_n^2 > 0$ .

# СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ «САМОСБОРКИ» АНИЗОТРОПНЫХ СТРУКТУР ИЗ ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ

## § 1. Постановка задачи и метод решения

Образ «самосборки» введен биологами для объяснения процесса образования оболочек простейших вирусов из разрозненных белковых субъединиц при отсутствии прямого влияния нуклеиновых кислот на этот процесс. Это явление близко к процессу кристаллизации и должно подчиняться законам статистической физики [41].

Возникает вопрос: может ли молекулярно-статистическая теория, основывающаяся на сферически-симметричных взаимодействиях, не постулируя наличия каких-либо анизотропных зародышей или манипулируя какими-либо граничными условиями, привести к выводу о спонтанном появлении анизотропных структур из однородной и изотропной среды при повышении ее плотности или понижении температуры? Целью настоящей главы является получение положительного ответа на поставленный вопрос. Причиной появления анизотропии является специфическая нелинейность исходных нелокально-статистических уравнений, описывающих статистическую динамику частиц, участвующих в самосборке.

Пусть  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  — функция распределения, определяющая поведение центров тяжести некоторых субъединиц, сохраняющих свою индивидуальность в процессе фазового перехода от пространственно-однородного распределения к анизотропным структурам. Для этой функции исходным является уравнение

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}} U \{f\} \nabla_{\mathbf{v}} f = 0, \quad (\text{X.1})$$

$$U \{f\} = \int K_{12}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v} + \\ + \iint K_{123}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|, |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}|) f(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) \times \\ \times f(\mathbf{r}'', \mathbf{v}'', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{v}' d\mathbf{v}''.$$

В условиях стационарного состояния ( $\partial/\partial t = 0$ ) выделим класс температурных распределений, определяя их требованием статистической независимости распределения по скоростям от распределения частиц по координатам:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = w(v^2) \rho(\mathbf{r}), \quad \int_{\infty} w(v^2) d\mathbf{v} = 1.$$

После подстановки в исходное уравнение находим

$$w(v^2) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta}\right), \quad \rho(r) = \rho_0 \exp\left[-\frac{U(r)}{\theta}\right],$$

где  $\theta$  — параметр, появляющийся при разделении переменных. Для молекулярного потенциала  $U(r)$  получаем основное нелинейное уравнение

$$U(r) = \rho_0 \int_{(\infty)} K_{12} \exp\left[-\frac{U(r')}{\theta}\right] dr' + \rho_0^2 \iint_{(\infty)} K_{123} \exp\left[-\frac{U(r')}{\theta}\right] \exp\left[-\frac{U(r'')}{\theta}\right] dr' dr'' \quad (X.2)$$

или, переходя к безразмерной величине  $\varphi(r) = -U(r)/\theta$ :

$$\varphi(r) = \lambda \int_{(\infty)} K_{12} e^{\varphi(r')} dr' - \lambda^2 \theta \iint_{(\infty)} K_{123} e^{\varphi(r')} e^{\varphi(r'')} dr' dr'', \quad (X.2')$$

где  $\lambda = -\rho_0/\theta$ .

В дальнейшем предположим, что трехчастичное взаимодействие не нарушает центрального закона сил

$$K_{123}(|r-r'|, |r-r''|, |r'-r''|) = K_{123}(|r-r'|, |r-r''|). \quad (X.3)$$

Нелинейное уравнение имеет пространственно-однородное решение

$$\varphi(r) = C = \text{const},$$

при этом постоянное значение  $C$  удовлетворяет трансцендентному уравнению

$$C = \lambda e^C \sigma_{12}(0) - \lambda^2 \theta e^{2C} \sigma_{123}(0), \quad (X.4)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} \sigma_{12}(0) &= \int_{(\infty)} K_{12}(|r-r'|) dr', \\ \sigma_{123}(0) &= \iint_{(\infty)} K_{123}(|r-r'|, |r-r''|) dr' dr''. \end{aligned} \quad (X.5)$$

Трансцендентное уравнение разрешимо при любых значениях температуры и плотности в случае

$$\sigma_{12}(0) > 0 \quad \text{и} \quad \sigma_{123}(0) < 0.$$

В обратном случае имеется граница существования этого решения, которое определяется из условий касания кривых

$$Y_1 = C, \quad Y_2 = \lambda e^C \sigma_{12}(0) - \lambda^2 \theta e^{2C} \sigma_{123}(0) \quad (X.6)$$

как функций параметра  $C$ .

Пространственно-однородное решение должно быть устойчиво по отношению к изменениям плотности. Это требование приводит к следующему условию на фазовую скорость распространения продольных волн в системе:

$$v_{\Phi}^2 \equiv \left(\frac{\omega}{k}\right)^2 = \frac{\sigma(k) \rho_0}{m} + \frac{3\theta}{m} + \dots > 0,$$

выведенному для длинных волн (см. гл. IV). Отсюда заключаем, что необходимо рассматривать первое условие  $\sigma(k)$  как более предпочтительное.

Возникают следующие задачи:

1. Определить характер новых состояний, в которые пространственно-однородное распределение при определенных условиях на параметры задачи может перейти.

2. Определить условия на температуру, плотность среды и силы молекулярного взаимодействия, при которых возникают структурные решения.

3. С помощью анализа нелинейных уравнений выявить, какие именно математические задачи приводят к появлению тех или иных структур из изотропного и однородного распределения.

Первые две задачи решаются путем линеаризации исходного уравнения около однородного распределения.

Положим

$$[\varphi(\mathbf{r}) = C + \delta\varphi(\mathbf{r}), \quad |\delta\varphi(\mathbf{r})| \ll C. \quad (\text{X.7})$$

Ограничиваясь линейными членами в (X.2'), имеем

$$\begin{aligned} C + \delta\varphi(\mathbf{r}) &= \lambda\sigma_{12}(0) e^C + \lambda e^C \int_{(\infty)} K_{12} \delta\varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \\ &\quad - \lambda^2 \theta e^{2C} \iint_{(\infty)} K_{123} \delta\varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' - \\ &\quad - \lambda^2 \theta \iint_{(\infty)} K_{123} \delta\varphi(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' - \lambda^2 \theta \sigma_{123}(0) e^{2C}. \end{aligned} \quad (\text{X.8})$$

Вводя обозначения

$$\begin{aligned} \lambda^* &= \lambda e^C, \quad K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = K_{12} - \lambda^* \theta (K_{123}^- + K_{123}^+), \\ K_{123}^- &= \int_{(\infty)} K_{123} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) d\mathbf{r}', \\ K_{123}^+ &= \int_{(\infty)} K_{123} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) d\mathbf{r}'', \end{aligned}$$

линейное уравнение (X.8) для  $\delta\varphi(\mathbf{r})$  можно записать так:

$$\delta\varphi(\mathbf{r}) = \lambda^* \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (\text{X.9})$$

Будем искать решение этого уравнения в виде суммы пространственных гармоник

$$\delta\varphi(r) = \sum_{m=-N}^{+N} C_m e^{ik_m r},$$

где  $C_m = C_{-m}^*$ . Числа  $N$  и  $C_m$  в линейном приближении остаются произвольными.

Подстановка дает условие разрешимости (дисперсионное уравнение) для этого класса функций

$$1 - \lambda^* \cdot 4\pi \int_0^\infty K(s) \frac{\sin k_m s}{k_m s} s^2 ds = 0 \quad (\text{X.10})$$

или

$$1 - \lambda^* \sigma(k_m) = 0. \quad (\text{X.10}')$$

При наличии значительных сил отталкивания на малых расстояниях и меньших сил притяжения на больших — функция  $\sigma(k)$  имеет вид, указанный на рис. 3. Наличие минимума функции в области отрицательных значений  $\sigma(k)$  обеспечивает существование решения дисперсионного уравнения при достаточно малой величине  $\lambda^*$ .

Два критических значения: для волнового числа и параметра  $\lambda^*$  — определяются условиями

$$\left. \frac{\partial \sigma(k)}{\partial k} \right|_{k=k_m} = 0, \quad \frac{1}{\lambda^*} = \min \sigma(k) \Big|_{k=k_m}. \quad (\text{X.11})$$

Для нейтральных атомов при  $K_{123} = 0$  мы конкретизировали  $K_{12}(|r - r'|)$  двумя типами формул (см. гл. II, § 4 и гл. VI, § 7), что позволяет конкретизировать связь между температурой, плотностью и силами молекулярного взаимодействия на границе перехода между бесструктурными и структурными состояниями среды, если воспользоваться тем или иным представлением для  $K_{12}(|r - r'|)$ .

Линейное уравнение определяет только модуль волнового вектора, но не фиксирует его направление в пространстве. Между тем комбинация гармоник с разным направлением векторов  $k_m$  определяет различные структуры.

Возникает вопрос: не накладывает ли «нелинейность» каких-либо ограничений на эти направления, а также на соответствующие амплитуды  $C_m$ ? Ниже покажем, что структурные решения у нелинейных уравнений возникают в двух различных задачах.

**Задача 1.** Рассматривая температуру и плотность как внешние параметры, поставим задачу о возникновении структурных состояний среды как задачу на ветвление решений нелинейного уравнения от исходного решения, с однородным и изотропным

распределением плотности. Если  $\varepsilon$  — малое изменение параметра  $\lambda^*$ , то полагаем

$$\lambda^* = \lambda_0^* + \varepsilon,$$

$$\delta\varphi = \varepsilon^{1/n}\delta\varphi_1 + \varepsilon^{2/n}\delta\varphi_2 + \varepsilon^{3/n}\delta\varphi_3 + \dots, \quad (\text{X.12})$$

где  $n$  — число «ветвей», которое теория должна определить, так же как и молекулярный потенциал (и плотность) в структурах.

Задача 2. Будем предполагать существование прямого и обратного влияния между значениями плотности среды и температуры, с одной стороны, и самими структурами — с другой, и искать появление структур как решение задачи на собственные значения параметра  $\lambda^*$  и собственные функции  $\delta\varphi$ , полагая в основу другое представление решения:

$$\lambda = \lambda_0^* + \varepsilon\lambda_1^* + \varepsilon^2\lambda_2^* + \dots, \quad (\text{X.13})$$

$$\delta\varphi = \varepsilon\delta\varphi_1 + \varepsilon^2\delta\varphi_2 + \varepsilon^3\delta\varphi_3 + \dots, \quad (\text{X.14})$$

где коэффициенты  $\lambda_1^*$ ,  $\lambda_2^*$  и т. д. являются новыми степенями свободы в задаче 2, по сравнению с первой задачей.

Каждая из задач приводит к структурам различных типов. Для обеих задач будем искать решение первого приближения в виде

$$\delta\varphi_1 = C^{(1)} + \sum_{m=-N}^{+N} C_m^{(1)} e^{ik_m r}, \quad (\text{X.15})$$

в точке возникновения самих структур модуль вектора  $|k_m|$  должен удовлетворять дисперсионному уравнению (X.10'), которое при простейших предположениях о функции  $\sigma(k)$  имеет только один корень

$$k_m^2 \equiv a^2 = \text{const}. \quad (\text{X.16})$$

С возрастанием числа  $N$  гармоник в предполагаемом решении возрастают осложнения самих структур. Рассмотрим, какие именно структуры соответствуют простейшим случаям ( $N = 1, 2, 3, 4$ ):

а)  $N = 1$ ; это соответствует периодически расположенным слоям в одном измерении, с простейшим распределением молекулярного потенциала в них

$$\delta\varphi_1(r) = A_1 \cos k_1 r, \quad |k_1| = a; \quad (\text{X.17})$$

б)  $N = 2$ , в этом случае возникают слои в двух направлениях

$$\delta\varphi_1(r) = A_2 \cos k_1 r + A_3 \cos k_2 r, \quad (\text{X.18})$$

$$|k_1| = |k_2| = a$$

и однородные прямоугольные призмы

$$\delta\varphi_1(r_{\perp}) = A_4 \cos k_x x \cos k_y y, \quad k_x^2 + k_y^2 = a^2; \quad (\text{X.19})$$

в)  $N = 3$ , комбинируя случаи а) и б), получаем прямоугольные призмы с периодической структурой по оси  $z$

$$\delta\varphi_1(\mathbf{r}) = A_5 \cos k_x x \cos k_y y + A_6 \cos k_z z, \quad (\text{X.20})$$

$$k_z = a = \sqrt{k_x^2 + k_y^2},$$

слои в трех направлениях

$$\delta\varphi_1(\mathbf{r}) = A_7 \cos k_1 r + A_8 \cos k_2 r + A_9 \cos k_3 r, \quad (\text{X.21})$$

$$k_1 + k_2 + k_3 \neq 0, \quad k_1^2 = k_2^2 = k_3^2 = a^2$$

и гексагональную призму, однородную по оси  $z$ ,

$$\delta\varphi_1(\mathbf{r}) = A_{10}(\cos k_1 r + \cos k_2 r + \cos k_3 r), \quad (\text{X.22})$$

$$k_1 + k_2 + k_3 = 0;$$

г)  $N = 4$ ; гексагональная призма с периодической структурой по оси  $z$

$$\delta\varphi_1(\mathbf{r}) = A_{11} \cos k_z z + A_{12}(\cos k_1 r + \cos k_2 r + \cos k_3 r), \quad (\text{X.23})$$

$$k_1 + k_2 + k_3 = 0, \quad k_z = |k_1| = |k_2| = |k_3| = a$$

и прямоугольная решетка

$$\delta\varphi_1(\mathbf{r}) = A_{13} \cos k_x x \cos k_y y \cos k_z z, \quad (\text{X.24})$$

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = a^2.$$

Тригонометрическая форма представления гексагональных призм, с замкнутым треугольником волновых векторов, использована, в связи с другой задачей, в работах [42].

В рамках линеаризованного уравнения все указанные решения правомерны и равноправны. Возникают, однако, вопросы:

1. Поддерживает ли учет нелинейности существование подобных решений?
2. Выделяет ли этот учет определенные решения (структуры) как особо предпочтительные?

## § 2. Теоремы о «самосборке»

**Т е о р е м а 1.** Разложение вида

$$\lambda^* = \lambda_0^* + \varepsilon, \quad (\text{X.25})$$

$$\delta\varphi = \varepsilon^{1/2} \delta\varphi_1 + \varepsilon \delta\varphi_2 + \varepsilon^{3/2} \delta\varphi_3 + \dots$$

приводит к решению, описывающему возникновение структур из пространственно-однородной среды. Эта задача относится к математической проблеме ветвления решений у исходного нелинейного интегрального уравнения. Условия ее разрешимости приводят

к возникновению структур простейших типов, но появление гексагональной структуры ( $N = 3$ ,  $k_1 + k_2 + k_3 = 0$ ) запрещено.

Подставляя указанные разложения (X.25) в уравнение (X.2') ( $\varphi(r) = C + \delta\varphi(r)$ ), приходим к следующей системе последовательных приближений:

$$C - \lambda_0^* \sigma_{12}(0) - \lambda^{*2} \theta \sigma_{123}(0) = 0,$$

$$\delta\varphi_1 - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \delta\varphi_1(r') dr' = 0, \quad (\text{X.26})$$

$$\delta\varphi_2 - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \delta\varphi_2(r') dr' = \sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0) +$$

$$+ \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \frac{1}{2} \delta\varphi_1^2(r') dr' -$$

$$- \lambda_0^{*2} \theta \iint_{(\infty)} K_{123} \delta\varphi_1(r') \delta\varphi_2(r'') dr' dr'',$$

.....

Из второго уравнения следует отсутствие постоянной составляющей потенциала

$$C^{(1)} \equiv 0,$$

так как из дисперсионного уравнения при  $k_m \neq 0$  следует

$$1 - \lambda_0^* \sigma(0) \neq 0.$$

Замечаем, что однородные части уравнений каждой строки имеют одинаковый вид:

$$\mathcal{L}\{\delta\varphi_i\} = \delta\varphi_i(r) - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \delta\varphi_i(r') dr' = 0. \quad (\text{X.27})$$

Поскольку ядро в (X.27) зависит от модуля разности, интегральный оператор  $\mathcal{L}\{\delta\varphi_i\}$  является самосопряженным, т. е.

$$\langle g^+ \mathcal{L}\{f\} \rangle = \langle \mathcal{L}^+ \{g^+\} f \rangle, \quad (\text{X.28})$$

где угловые скобки обозначают интегрирование по координатам во всей области определения,  $g^+$  и  $f$  — любые комплексные функции.

Выберем вместо  $g^+(r)$  решение однородного уравнения

$$\mathcal{L}_* (g^+) = 0,$$

т. е.  $g^+(r) = e^{ik_m r} \equiv w_n^+(r)$ , а вместо функции  $f(r)$  — решение неоднородных уравнений нашей системы. Тогда

$$\langle w_n^+(r), \mathcal{L}\{\delta\varphi_i(r)\} \rangle = \langle \mathcal{L}^+ \{w_n^+(r)\} \delta\varphi_i(r) \rangle = 0. \quad (\text{X.29})$$

Это условие самосопряженности оператора  $\mathcal{L}$  одновременно является условием разрешимости неоднородных уравнений системы, так как оно включает в себя условие ортогональности правых частей неоднородных уравнений к решениям однородного уравнения.

Рассмотрим условие разрешимости порядка  $\varepsilon^2$ . Общая структура решений состоит из следующих гармоник:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_1 &= C^{(1)} + \sum_m C_m^{(1)} e^{i\mathbf{k}_m \mathbf{r}}, \\ \delta\varphi_2 &= C^{(2)} + \sum_m C_m^{(2)} e^{i\mathbf{k}_m \mathbf{r}} + \sum_{m,n} C_{m,n}^{(2)} e^{i(\mathbf{k}_m + \mathbf{k}_n) \mathbf{r}}, \\ &\dots \end{aligned} \quad (\text{X.30})$$

При этом  $C^{(1)} = 0$ .

Условие разрешимости порядка  $\varepsilon^2$  принимает вид

$$\begin{aligned} \langle w'_n \mathcal{L} \{ \delta\varphi_2 \} \rangle &= [\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0)] \langle w'_n \rangle + \\ &+ \sum_{m,l} \left[ \frac{\lambda_0^*}{2} \sigma(|\mathbf{k}_m + \mathbf{k}_l|) - \lambda_0^{*2} \theta \sigma_{123}(|\mathbf{k}_m|, |\mathbf{k}_l|) \right] C_m C_l \langle w'_n w_m w_l \rangle = 0, \end{aligned} \quad (\text{X.31})$$

где обозначено

$$\sigma(|\mathbf{k}_m + \mathbf{k}_l|) = \int_{(\infty)} K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{i(\mathbf{k}_m + \mathbf{k}_l) \mathbf{r}'} d\mathbf{r}', \quad (\text{X.32})$$

$$\sigma_{123}(|\mathbf{k}_m|, |\mathbf{k}_l|) = \iiint_{(\infty)} K_{123}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) e^{i\mathbf{k}_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + i\mathbf{k}_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}''.$$

Разобьем область интегрирования на целое число кубиков, ребра которых кратны периоду  $2\pi/|\mathbf{k}_m|$ . Тогда

$$\langle e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}} \rangle = \langle w'_n \rangle = 0.$$

Для оставшегося члена в выражении (X.31) возникают две возможности:

#### 1. Геометрическая сумма векторов

$$\mathbf{k}_n + \mathbf{k}_m + \mathbf{k}_l = 0, \quad |\mathbf{k}_n| = |\mathbf{k}_m| = |\mathbf{k}_l| = a$$

обращается в нуль при произвольных значениях  $n, m, l$ ; тогда  $\langle w'_n w_m w_l \rangle \neq 0$  и для выполнения условий разрешимости  $\langle w'_n \mathcal{L} \{ \delta\varphi_2 \} \rangle = 0$  необходимо обращение в нуль коэффициентов при амплитудах  $C_m^{(1)} C_l^{(1)}$ :

$$\frac{\lambda_0^*}{2} \sigma(|\mathbf{k}_n + \mathbf{k}_l|) - \lambda_0^{*2} \theta \sigma_{123}(|\mathbf{k}_m|, |\mathbf{k}_l|) = 0.$$

Последнее равенство, однако, является новым ограничением на волновые векторы (новым дисперсионным уравнением), которое, вообще говоря, несовместимо с (X.10') (где  $\lambda = \lambda_j^*$ ).

Приходим к заключению, что появление структур, для которых волновые векторы образуют треугольник, запрещено уже вторым приближением исходной системы уравнений.

На основании сказанного в § 1 этой главы запрещенными структурами являются гексагональные призмы.

2. Геометрическая сумма векторов отлична от нуля:  $k_n + k_m + k_l \neq 0$ , тогда условие разрешимости выполняется без каких-либо дополнительных условий, так как

$$\langle w'_n \rangle = 0, \quad \langle w'_n w'_m w'_l \rangle = 0.$$

В этом случае появление простейших структур (периодические слои в одном, двух, трех измерениях, прямоугольные призмы, прямоугольные решетки) оказывается возможным.

Смысл первой теоремы заключается в утверждении, что появление указанных структур является фазовым переходом, поскольку нарушается аналитичность функции  $\delta\varphi(r)$  в точке бифуркации  $\lambda^* = \lambda_0^*$ , ввиду наличия ветвления решений. Конкретизация неаналитичности требует определения величины малого параметра  $\varepsilon$  путем разрешения высших приближений. Наличие конечного значения малого параметра при решении нелинейных уравнений известно из некоторых нелинейных задач гидродинамики и теплопроводности [42].

Если окажется, что разрешимость высших приближений потребует не равно нулю значения  $\varepsilon$ , то налицо фазовый переход первого рода, в противном случае могут иметь место фазовые переходы высших порядков.

Мы ограничились рассмотрением только второго приближения. Получение высших приближений в близкой задаче рассматривалось в [7, 8]. Заметим, что в высших приближениях амплитуды гармоник  $C_m^{(1)}, C_m^{(2)}, \dots$  определяются через температуру, плотность и силы молекулярного взаимодействия. Заметим также, что в условиях теоремы свобода внешнего вмешательства в образование структур относится к изменению плотности и температуры как внешних параметров, входящих в коэффициенты  $\lambda^*$  и  $\theta$ .

**Т е о р е м а 2.** Разложение типа

$$\begin{aligned} \lambda^* &= \lambda_0^* + \varepsilon\lambda_1^* + \varepsilon^2\lambda_2^* + \dots, \\ \delta\varphi &= \varepsilon\delta\varphi_1 + \varepsilon^2\delta\varphi_2 + \varepsilon^3\delta\varphi_3 + \dots \end{aligned}$$

приводит к появлению решений, описывающих гексагональные структуры, возникающие из пространственно-однородной среды. В этом случае возникновение простейших структур, разрешаемых теоремой 1, запрещено.

При указанном разложении система уравнений последовательных приближений приобретает вид

$$C = \lambda_0^* \sigma_{12}(0) - \lambda_0^{*2} \theta \sigma_{123}(0),$$

$$\delta \varphi_1(r) - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \delta \varphi_1(r') dr' = \lambda_1^* [\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0)],$$
(X.33)

$$\begin{aligned} \delta \varphi_2(r) - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K(|r - r'|) \delta \varphi_2(r') dr' = \\ = \lambda_1^* \int_{(\infty)} \tilde{K} \delta \varphi_1(r') dr' + \frac{\lambda_0^*}{2} \int_{(\infty)} K (\delta \varphi_1(r'))^2 dr' - \\ - \lambda_0^{*2} \theta \int_{(\infty)} \int_{(\infty)} K_{123} \delta \varphi_1(r') \delta \varphi_1(r'') dr' dr'' + \\ + \lambda_2^* [\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0)] - \lambda_1^{*2} \theta \sigma_{123}(0), \\ \dots \end{aligned}$$

где

$$\tilde{K} \equiv \tilde{K}(|r - r'|) = K_{12} - 2\lambda_0^* \theta (K_{123}^- + K_{123}^+).$$

Условие разрешимости порядка  $\epsilon^1$  автоматически выполняется:

$$\langle w'_n \mathcal{L} \{ \varphi_1(r) \} \rangle = \lambda_1^* [\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0)] \langle w'_n \rangle = 0, \quad (X.34)$$

так как  $\langle w'_n \rangle = 0$ , постоянная  $C^{(1)}$  определяется через коэффициент  $\lambda_1^*$ :

$$C^{(1)} = \lambda_1^* \frac{\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^* \theta \sigma_{123}(0)}{1 - \lambda_0^* \sigma(0)}, \quad (X.35)$$

знаменатель в нуль не обращается, так как решение задачи приводится в окрестности решения дисперсионного уравнения (X.10') с  $\lambda = \lambda_0^*$  и  $|\mathcal{K}| = |\mathbf{k}_m| \neq 0$ .

Появившаяся степень свободы  $\lambda_1^*$  определяет «постоянную составляющую» потенциала и средней плотности в первом приближении и ей пропорциональна.

Условие разрешимости порядка  $\epsilon^2$  таково:

$$\begin{aligned} \langle w'_n \mathcal{L} \{ \delta \varphi_2 \} \rangle = \sum_m C_m^{(1)} \{ \lambda_1^* \tilde{\sigma}(k_m) + C^{(1)} \lambda_0^* [\sigma(k_m) - \lambda_0^* \theta (\sigma_{123}^-(k_m) + \\ + \sigma_{123}^+(k_m))] \} \langle w'_n w_m \rangle + \sum_{m,l} C_m^{(1)} C_l^{(1)} \left[ \frac{\lambda_0^*}{2} \sigma(k_m + k_l) - \right. \\ \left. - \lambda_0^{*2} \theta \sigma_{123}(|\mathbf{k}_l|, |\mathbf{k}_m|) \right] \langle w'_n w_m w_l \rangle = 0 \quad (X.36) \\ \left( (\tilde{\sigma}(k_m), \sigma(k_m)) = 4\pi \int_0^\infty (\tilde{K}, K) \frac{\sin k_m s}{k_m s} s^2 ds \right). \end{aligned}$$

Рассмотрим и здесь два случая:

1.  $k_n + k_m + k_l = 0$ , тогда  $\langle w_n w_m w_l \rangle \neq 0$ .

Система уравнений для неизвестных амплитуд  $C_m^{(1)}$  и новой степени свободы  $\lambda_1^*$  содержит неизвестных больше, чем уравнений. Число неизвестных равно  $(2N + 1)$ , число уравнений  $2N$ , так как  $n = -N, \dots, -1, +1, \dots, +N$ . Таким образом, задача становится определенной, только если одна из амплитуд —  $C_m^{(1)}$  или  $\lambda_1^*$  — дополнительно фиксирована.

На основании вышеуказанного естественно связывать параметр  $\lambda_1^*$  со средней плотностью среды при наличии структур и задавать его из экспериментальных данных.

«Условие треугольника» для волновых векторов (при  $N = 3$ ) является выражением гексагональных структур, возникающих из пространственно-однородной среды.

2. Если  $k_n + k_m + k_l \neq 0$ , то  $\langle w_n w_m w_l \rangle = 0$ , и поскольку  $\langle w_n w_m \rangle$  в нуль не обращается для любых значений  $m$ , необходимо, чтобы коэффициент при  $\langle w_n w_m \rangle$  равнялся нулю:

$$\lambda^* \tilde{\sigma}(k_m) + C^{(1)} \lambda_0^*(k_m) - C^{(1)} \lambda_0^{*2} \theta [\sigma_{123}(k_m) + \sigma_{1\bar{2}\bar{3}}(k_m)] = 0 \quad (\text{X.37})$$

$$\left( C^{(1)} = \lambda_1^* \frac{\sigma_{12}(0) - 2\lambda_0^{*2} \theta \sigma_{123}(0)}{1 - \lambda_0^* \sigma(0)} \right).$$

Это приводит к новому ограничению на значение модуля волнового числа  $k_m$ , т. е. новому дисперсионному уравнению, которое не обязано иметь общих решений с прежним, получающимся из условий разрешимости первого приближения  $1 - \lambda_0^* \sigma(k_m) = 0$ .

Таким образом, уже второе приближение приводит к запрещению появления структур, разрешаемых теоремой 1.

Отличие условий теоремы 2 от условий теоремы 1 заключается в наличии прямого и обратного влияния самих структур на значения температур и плотностей среды, в которой эти структуры возникают.

Обратное влияние структур на собственное значение параметра осуществляется за счет новых степеней свободы  $\lambda_1^*$ ,  $\lambda_2^*$ , ...:

$$\lambda^* = \lambda_0^* + \varepsilon \lambda_1^* + \varepsilon^2 \lambda_2^* + \dots, \quad (\text{X.38})$$

которые сами зависят от собственных функций, т. е. от амплитуд  $C^{(1)}$ ,  $C_m^{(1)}$ , ...

**Т е о р е м а 3.**

Теоремы 1 и 2 распространяются и на заряженные субъединицы (ионы), взаимодействующие через акустическое поле в окружающей нейтральной среде, с тем отличием, что «самосборка» ионных структур происходит в определенном интервале темпера-

тур, нижняя грань которого пропорциональна концентрации ионов, верхняя — концентрации нейтральной среды.

На основании главы VIII энергия взаимодействия двух ионов через промежуточную систему (акустическое поле в нейтральной среде) выражается формулой

$$K_{ii}(|r - r'|) = \begin{cases} \frac{\gamma^2}{|r - r'|} \cos q^+ |r - r'|, & |r - r'| \geq \frac{\pi}{q_{\max}}, \\ \text{const}, & |r - r'| < \frac{\pi}{q_{\max}}. \end{cases}$$

Эффективный заряд и пространственный период определяются через параметры взаимодействия иона с частицами нейтральной среды  $\sigma_{ia}(q^+)$  и нейтральных субъединиц между собой  $\sigma_{aa}(q^+)$ :

$$\gamma^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{q^{+2} \sigma_{ia}(q^+)}{\sigma_{aa}(q^+)}, \quad q^+ = \frac{2m_i}{\hbar} v_{\Phi}$$

$$\left( \sigma(q) = 4\pi \int_0^{\infty} K(s) \frac{\sin qs}{qs} s^2 ds \right).$$

Фазовая скорость акустических волн зависит от плотности нейтральной среды и слабо зависит от ее температуры:

$$v_{\Phi}^2 = \frac{\sigma_{aa}(q^+) \rho_0}{m_a} + \frac{30}{m_a} + \dots$$

На основании § 2 гл. VII коллективные потенциалы электрических сил и сил взаимодействия ионов через промежуточную систему определяются уравнениями

$$\varphi(r) = \left( -\frac{C_i}{\theta_i} \right) \int K_{ii}(|r - r'|) \exp[\varphi(r') + \psi(r')] dr', \quad (\text{X.39})$$

$$\Delta\psi(r) = -4\pi e^2 \left\{ -\frac{C_i}{\theta_i} \exp[\varphi(r) + \psi(r)] + \frac{C_e}{\theta_e} \exp \left[ -\psi(r) \frac{\theta_i}{\theta_e} \right] \right\}.$$

Мы перешли от  $U(r)$  и  $\Phi(r)$  к

$$\varphi(r) = -\frac{U(r)}{\theta_i}, \quad \psi(r) = -\frac{\Phi(r)}{\theta_i};$$

$C_e, \theta_e$  — концентрация и температура электронной компоненты.

При известных условиях существует пространственно-однородное распределение потенциалов (и плотности распределения ионов и электронов). Полагаем

$$\varphi = \varphi_0 = \text{const}, \quad \psi = \psi_0 = \text{const}. \quad (\text{X.40})$$

Учитываем, что если ограничиться случаем  $q_{\max} \gg q^+$ , то

$$\int_0^{\infty} K_{ii}(s) 4\pi s^2 ds = -\frac{4\pi\gamma^2}{q^{+2}}. \quad (\text{X.41})$$

Условие  $q_{\max} > q^+$  осуществляется (см. § 3, гл. VIII), условие  $q_{\max} \gg q^+$ , не нарушая порядка основных величин и связей между ними, упрощает результаты. Подстановка (X.40) и (X.41) в исходную систему уравнений дает

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}\theta_i} \exp(\varphi_0 + \psi_0), \\ -C_i \exp(\varphi_0 + \psi_0) &= C_e \exp\left(-\psi_0 \frac{\theta_i}{\theta_e}\right). \end{aligned} \quad (\text{X.42})$$

Вследствие нейтральности среды, которая получилась как следствие пространственной однородности, электрический потенциал  $\psi_0$  можно нормировать на нуль ( $\psi_0 \equiv 0$ ). Для определения  $\varphi_0$  и  $C_e$  имеем

$$C_e = C_i \exp \varphi_0, \quad \varphi_0 = \lambda \exp \varphi_0, \quad \lambda = \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}\theta_i} > 0.$$

Действительное значение для  $\varphi_0$  получается из решения трансцендентного уравнения только для случая, когда

$$\lambda \leq 1/e,$$

при этом  $\varphi_0 > 0$  (см. гл. VII, § 2).

Присоединим сюда требование на достаточно большую величину концентрации нейтральных частиц, которое необходимо для существования используемого вида взаимодействия между ионами (см. гл. VIII):

$$\theta_a < \frac{\sigma_{aa}(q^+) C_a}{3} \quad (\theta_a \sim \theta_i).$$

Приходим к существованию интервала температур, внутри которого возможно существование пространственно-однородного решения:

$$\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}} e > \theta_i > \frac{\sigma_{aa}(q^+) C_a}{m_a}.$$

Поставим вопрос о возможности образования структур в этом конденсированном состоянии ионно-электронной среды.

Полагаем

$$\varphi(r) = \varphi_0 + \delta\varphi(r), \quad \psi(r) = \psi_0 + \delta\psi(r), \quad \psi_0 \equiv 0, \quad (\text{X.43})$$

тогда неоднородные потенциалы удовлетворяют системе

$$\begin{aligned} \varphi_0 + \delta\varphi(r) &= \left(-\frac{C_i}{\theta_i}\right) e^{\varphi_0} \int K_{ii}(|r-r'|) e^{\delta\varphi(r')+\delta\psi(r')} dr', \\ \Delta\delta\psi(r) &= -4\pi e^2 \left(-\frac{C_i}{\theta_i}\right) e^{\varphi_0} [e^{\delta\varphi(r)+\delta\psi(r)} - e^{-\delta\psi(r)\theta_i/\theta_e}]. \end{aligned} \quad (\text{X.44})$$

В условиях теоремы 1 решается задача на ветвление решений, поэтому исходим из разложений

$$\begin{aligned} \lambda^* &= \lambda_0^* + \varepsilon, \quad \lambda_0^* = -\frac{C_i}{\theta_i} e^{\varphi_0}, \\ \delta\varphi &= \varepsilon^{1/2}\delta\varphi_1 + \varepsilon\delta\varphi_2 + \varepsilon^{3/2}\delta\varphi_3 + \dots, \\ \delta\psi &= \varepsilon^{1/2}\delta\psi_1 + \varepsilon\delta\psi_2 + \varepsilon^{3/2}\delta\psi_3 + \dots \end{aligned} \quad (\text{X.45})$$

Система уравнений последовательных приближений принимает вид

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= \lambda_0 e^{\varphi_0} \sigma_{ii}(0) \equiv \lambda_0^* \sigma_{ii}(0), \\ \delta\varphi_1 - \lambda_0^* \int K_{ii}(\delta\varphi_1 + \delta\psi_1) dr' &= 0, \\ \Delta\delta\psi_1 + 4\pi e^2 \lambda_0^* \left(1 + \frac{\theta_i}{\theta_e}\right) \delta\psi_1 &= -4\pi e^2 \lambda_0 \delta\varphi_1, \end{aligned} \quad (\text{X.46})$$

$$\begin{aligned} \delta\varphi_2 - \lambda_0^* \int K_{ii}(\delta\varphi_2 + \delta\psi_2) dr' &= \\ &= \sigma_{ii}(0) + \lambda_0 e^{\varphi_0} \int K_{ii} \frac{1}{2} (\delta\varphi_1^2 + \delta\psi_1^2 + 2\delta\varphi_1\delta\psi_1) dr', \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta\delta\psi_2 + 4\pi e^2 \lambda_0^* \left(1 + \frac{\theta_i}{\theta_e}\right) \delta\psi_2 &= \\ &= -4\pi e^2 \lambda_0^* \left[ \frac{1}{2} (\delta\varphi_1^2 + \delta\psi_1^2 + 2\delta\varphi_1\delta\psi_1) + \frac{1}{2} \left(-\delta\psi_1 \frac{\theta_i}{\theta_e}\right)^2 \right], \\ &\dots \end{aligned}$$

Решения первого приближения, как и ранее, отыскиваем в виде

$$\delta\varphi_1 = \sum_{m=-N}^{+N} C_m^{(1)} e^{ik_m r}, \quad \delta\psi_1 = \sum_{m=-N}^{+N} C_m^{(1)\psi} e^{ik_m r},$$

подстановка их в уравнения приводит к условию, накладываемому на модуль волнового вектора  $|k_m|$ :

$$\begin{aligned} \frac{q^{+2}\theta_i}{4\pi\gamma^2 C_i} &= e^{\varphi_0} \frac{1}{1 - k_m^2/q^{+2}} \frac{k_m^2 + \frac{\theta_i}{\theta_e} \kappa_0^2 e^{\varphi_0}}{k_m^2 + (1 + \theta_i/\theta_e) \kappa_0^2 e^{\varphi_0}} > e, \\ \varphi_0 &= \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^{+2}\theta_i} e^{\varphi_0}, \quad \kappa_0^2 = \frac{4\pi e^2 C_i}{\theta_i}. \end{aligned} \quad (\text{X.47})$$

Эти соотношения удовлетворяются действительным значением  $|k_m'|$  в интервале от  $|k_m| \approx 0$  до  $|k_m| \lesssim q^+$ . С увеличением температуры  $\theta_i$  или уменьшением плотности  $C_i$   $|k_m|$  стремится к предельному значению  $q^+$ .

Обозначим произвольную гармонику, являющуюся решением однородных уравнений второго приближения, через  $w_n^*(r)$ :

$$w_n^*(r) = e^{ik_n r}, \quad w_m^*(r) = e^{ik_m r}.$$

Условие ортогональности неоднородных частей второго приближения к произвольному решению однородных уравнений имеет вид

$$\sigma_{ii}(0) \langle w_n^* \rangle + \lambda_0 e^{\varphi_0} \sum_{l,p} \sigma_{ii}(|k_l + k_p|) \frac{1}{2} (C_l^{(1)} C_p^{(1)})_{\varphi} + C_l^{(1)} C_p^{(1)} + C_l^{(1)} C_p^{(1)}_{\psi} \times \\ \times \langle w_n^* w_l w_p \rangle = 0, \quad (\text{X.48})$$

$$4\pi e^{2\lambda_0 e^{\varphi_0}} \sum_{l,p} \frac{1}{2} (C_l^{(1)} C_p^{(1)})_{\varphi} + 2 \left( 1 + \frac{\theta_i^2}{\theta_e^2} \right) C_l^{(1)} C_p^{(1)}_{\psi} + C_l^{(1)} C_p^{(1)}_{\psi} \langle w_n^* w_l w_p \rangle = 0.$$

Эти условия выполняются, если

$$\langle w_n^* w_l w_p \rangle = 0$$

при любых значениях  $n, l, p$ , т. е. в случае

$$k_n + k_l + k_p \neq 0,$$

и не выполняются — для противоположного случая

$$\langle w_n^* w_l w_p \rangle \neq 0,$$

либо потому, что требуется новое дисперсионное соотношение

$$\sigma_{ii}(|k_l + k_p|) = 0,$$

либо число условий превышает число степеней свободы, которыми можно распорядиться. Число условий на  $C_l^{(1)}$  и  $C_p^{(1)}$  равно  $4N^2$ , тогда как число степеней свободы равно  $4N$ .

Таким образом, теорема 1 в применении к образованию плазменных структур доказана.

В условиях теоремы 2 решается задача на определение собственных значений и собственных функций у исходных нелинейных уравнений, поэтому полагаем

$$\lambda^* = \lambda_0^* + \varepsilon \lambda_1^* + \varepsilon^2 \lambda_2^* + \dots, \\ \delta\varphi = \varepsilon \delta\varphi_1 + \varepsilon^2 \delta\varphi_2 + \varepsilon^3 \delta\varphi_3 + \dots, \\ \delta\psi = \varepsilon \delta\psi_1 + \varepsilon^2 \delta\psi_2 + \varepsilon^3 \delta\psi_3 + \dots \quad (\text{X.49})$$

Система уравнений последовательных приближений имеет вид

$$\left. \begin{aligned} \varphi_0 &= (-C_i/\theta_i)\sigma_{ii}(0)e^{\varphi_0}, \\ \delta\varphi_1 - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K_{ii}(\delta\varphi_1 + \delta\psi_1) dr' &= \lambda_1^* \sigma_{ii}(0), \\ \Delta\delta\psi_1 + 4\pi e^2 \lambda_0^* (1 + \theta_i/\theta_e) \delta\psi_1 &= -4\pi e^2 \lambda_0^* \delta\varphi_1 \end{aligned} \right\} \lambda_0^* = -\frac{C_i}{\theta_i} e^{\varphi_0},$$

$$\delta\varphi_2 - \lambda_0^* \int_{(\infty)} K_{ii}(\delta\varphi_2 + \delta\psi_2) dr' =$$

$$= \lambda_0^* \int_{(\infty)} K_{ii} \frac{1}{2} (\delta\varphi_1^2 + \delta\psi_1^2 + 2\delta\varphi_1 \delta\psi_1) dr' + \lambda_1^* \int_{(\infty)} K_{ii}(\delta\varphi_1 + \delta\psi_1) dr',$$

$$\Delta\delta\psi_2 + 4\pi e^2 \lambda_0^* (1 + \theta_i/\theta_e) \delta\psi_2 =$$

$$= -4\pi e^2 \lambda_0^* [\delta\varphi_2 + 1/2 (\delta\varphi_1^2 + \delta\psi_1^2 + 2\delta\varphi_1 \delta\psi_1) + 1/2 (\delta\psi_1)^2 \theta_i^2/\theta_e^2],$$

.....

Решение первого приближения ищем в виде

$$\delta\varphi_1 = C^{(1)} + \sum_m^{(1)} C_m^\varphi e^{ik_m r}, \quad \delta\psi_1 = \sum_l^{(1)} C_l^\psi e^{ik_m r}.$$

Модуль волнового числа удовлетворяет прежнему дисперсионному уравнению из теоремы 1 для плазменных структур, постоянная  $C^{(1)}$  определяется через коэффициент  $\lambda_1^*$ :

$$C^{(1)} = \lambda_1^* \frac{\sigma_{ii}(0)}{1 - \lambda_0^* \sigma_{ii}(0)}. \quad (\text{X.51})$$

Знаменатель не должен обращаться в нуль, что накладывает условие на решение нулевого приближения

$$\varphi_0 = \frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^2 \theta_i} e^{\varphi_0} \equiv \left[ -\frac{C_i}{\theta_i} \sigma_{ii}(0) \right] e^{\varphi_0} = \lambda_0^*,$$

а именно необходимо, чтобы  $\varphi_0 \neq 1$ ,  $\frac{4\pi\gamma^2 C_i}{q^2 \theta_i} < \frac{1}{e}$  и не могло равняться  $1/e$ .

Условия разрешимости уравнений порядка  $e^2$  таковы:

$$\lambda_1^* \sum_m^{(1)} (C_m^\varphi + C_m^\psi) \sigma_{ii}(k_m) \langle w'_n w_m \rangle +$$

$$+ \lambda_0^* \sum_{m,l}^{(1)} \sigma_{ii}(|k_m + k_l|) \frac{1}{2} (C_m^\varphi C_l^\varphi + C_m^\psi C_l^\psi + 2C_m^\varphi C_l^\psi) \langle w'_n w_m w_l \rangle = 0,$$

$$(\text{X.52})$$

$$-4\pi e^2 \lambda_0^* \left[ \sum_{m,l}^{(1)} \frac{1}{2} (C_m^\varphi C_l^\psi + C_m^\psi C_l^\varphi + 2C_m^\varphi C_l^\psi) \right] \langle w'_n w_m w_l \rangle = 0.$$

Если  $k_n + k_m + k_l \neq 0$ , то  $\langle w'_n w_m w_l \rangle = 0$ , но поскольку  $\langle w'_n, w_m \rangle$  в нуль не обращается для любых значений  $n$ , необходимо,

чтобы коэффициент при  $\langle w'_n w_m \rangle$  равнялся нулю:

$$(C_m^{(1)\varphi} + C_m^{(1)\psi}) \sigma_{ii}(k_m) = 0.$$

На основании решения первого приближения имеем

$$C_m^{(1)\varphi} \left[ \frac{k_m^2 + \frac{4\pi e^2 C_i}{\theta_i} \frac{\theta_i}{\theta_e} e^{\varphi_0}}{k_m^2 + \frac{4\pi e^2 C_i}{\theta_i} \left(1 + \frac{\theta_i}{\theta_e}\right) e^{\varphi_0}} \right] \left( -\frac{4\pi\gamma^2}{q^{+2} - k_m^2} \right) = 0, \quad (\text{X.53})$$

но это равенство невозможно при  $C_m^{(1)\varphi} \neq 0$ .

Таким образом, решение задачи на собственные значения запрещает появление структур, разрешаемых теоремой 1.

Если  $k_n + k_m + k_i = 0$ , а  $\langle w'_n w_m w_i \rangle \neq 0$ , то в этом случае система уравнений для амплитуд  $C_m^{(1)\varphi}$  и  $C_i^{(1)\psi}$  и новой степени свободы  $\lambda_1^i$  содержит  $(2N + 1) + 2N$  неизвестных величин, число же уравнений  $2N + 2N$ , так как индексы  $n$  и  $m$  у функций  $w'_n$ ,  $w_m$  пробегают значения  $n, m = -N, \dots, -1, +1, \dots, +N$ . Задача становится определенной, если дополнительно известен коэффициент  $\lambda_1^i$ . Поскольку постоянная составляющая потенциала определяется через  $C^{(1)\varphi}$ , то задание этого коэффициента естественно, так как этим определяется средняя плотность среды при наличии структур. Таким образом, теорема 2 доказана.

В итоге приходим к следующим заключениям:

1. Поставленный вопрос о возможности возникновения анизотропных структур из однородной и изотропной среды, без участия анизотропных факторов в молекулярных силах и граничных условиях, получает положительный ответ. Анизотропию структур обуславливает «статистическая нелинейность» теории.

2. При непрерывном изменении скалярного параметра, из пространственно-однородного распределения спонтанным образом возникают структуры.

3. Две задачи приводят к явлению «самосборки»: задача на ветвление решений нелинейного уравнения при непрерывном изменении температуры и плотности как внешних параметров и задача на определение спектра собственных значений и собственных функций. Каждая из этих двух задач ведет к возникновению структур, запрещаемых другой задачей.

4. Условия «самосборки» плазменных структур, при взаимодействии ионов через промежуточную систему, особенно характерны для биологических сред, так как в эти условия входят: а) наличие достаточно плотной нейтральной среды, окружающей ионы, и б) наличие вполне определенного интервала температур, при которых могут существовать плазменные структуры.

ГЛАВА XI

**КОВАРИАНТНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ  
УРАВНЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ  
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕ  
ОПОРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ВОСЬМИ ИЗМЕРЕНИЙ**

---

§ 1. Пространство опорных элементов

Рассмотрим совокупность положений частиц и времени. Эти величины зависят от координатной системы и хода лабораторных часов. Если не предполагать ограничивающих условий галилеевого времени, естественно ввести четырехмерное пространство-время.

Если  $c$  есть постоянная размерность скорости, которую пока не будем фиксировать, то  $x^0 = ct$ ,  $x^1$ ,  $x^2$ ,  $x^3$  суть четыре величины одинаковой физической размерности: обозначим их через  $x^\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2, 3$ . В разных системах наблюдения они могут меняться с сохранением аналитической связи

$$x^{\alpha'} = \varphi^{\alpha'}(x^0, x^1, x^2, x^3), \quad (\text{XI.1})$$

здесь индекс  $\alpha'$  одновременно обозначает как отличие новых координат от старых, так и изменение самого индекса  $\alpha$ ,  $\varphi^{\alpha'}$  — произвольные функции, ограниченные только условием

$$\det \left| \frac{\partial \varphi^{\alpha'}}{\partial x^\beta} \right| \neq 0. \quad (\text{XI.2})$$

Пусть  $\tau$  есть собственное время — показание часов, связанных с частицами, и, следовательно, инвариантное по отношению к преобразованию  $x^\alpha$ , зависящему от состояния движения и хода часов экспериментатора. Вопрос о связи между лабораторным и собственным временем требует конкретизации физических условий, и мы его оставим пока открытым. Эта связь должна раскрываться теорией на соответствующем этапе ее развития. С помощью собственного времени введем четырехмерную скорость. Так как в процессе движения частиц  $x^\alpha = x^\alpha(\tau)$ , то можно ввести  $u^\alpha = dx^\alpha/d\tau$ , при этом нулевая компонента  $u^0 = dx^0/d\tau = c dt/d\tau$  указывает на существование новой, дополнительной степени свободы частиц, исключение которой заранее, без ограничивающих условий не является очевидным. Поэтому связь между  $t$  и  $\tau$  оставим пока не конкретизированной в той же мере, как и связь между  $x^i$  и  $\tau$  при  $i = 1, 2, 3$ .

Обратим внимание на следующий факт: координаты и скорости не являются равноправными величинами, понятия скоростей содержат дополнительную информацию по сравнению с координа-

тами. Скорости включают новый элемент — время  $\tau$  — и связаны с ним предельным переходом

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\Delta x^\alpha}{\Delta\tau} = \frac{dx^\alpha}{d\tau} \equiv u^\alpha. \quad (\text{XI.3})$$

Собственное время, предельный переход — дополнительные понятия, содержащиеся в определении скорости, по сравнению с координатами.

По отношению к законам преобразований координаты и скорости ведут себя также по-разному. Для координат имеем

$$x^{\alpha'} = \varphi^{\alpha'}(x^0, \dots, x^3),$$

$$dx^{\alpha'} = \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi^{\alpha'}}{\partial x^\alpha} dx^\alpha = \sum_{\alpha} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha} dx^\alpha = dx^\alpha \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha} \quad (\text{XI.4})$$

или, деля на  $d\tau$ , где  $\tau = \text{Inv}$ , получим

$$u^{\alpha'} = u^\alpha \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha}.$$

В итоге формулы преобразования координат и скоростей таковы:

$$x^{\alpha'} = \varphi^{\alpha'}(x^0, \dots, x^3), \quad u^{\alpha'} = u^\alpha \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha}. \quad (\text{XI.5})$$

В то время как координаты преобразуются по любому закону, в том числе и нелинейно, скорости преобразуются всегда по линейному закону.

В евклидовом пространстве основными преобразованиями координат являются перенос начала и вращение. Эти преобразования являются линейными, вследствие чего не возникает указанной разницы в координатах и скоростях. Это позволило ввести фазовое пространство координат и скоростей, в котором заключена равноправность указанных величин.

Указанная разница проявляется в так называемом пространстве опорных элементов (это пространство ввел Е. Картан и другие геометры). Пространство опорных элементов включает в себя следующие понятия: 1) координатное пространство, 2) касательное пространство и порядок касания, 3) систему векторов, опирающихся на точку касания и лежащих в касательном пространстве. Пространство опорных элементов объединяет координатное пространство как пространство возможных значений центров тяжести частиц и пространство возможных значений кинематических свойств частиц, например скоростей частиц (а также может содержать в себе векторы ускорений сколь угодно большого порядка в зависимости от порядка касания).

Ценность пространства опорных элементов состоит в точном оформлении нового понимания частицы, которая характеризуется континуумом возможных значений координат и скоростей (а также и ускорений произвольного порядка), в отличие от классического образа локализованной частицы с определенным значением координат и скоростей. Подобное понимание возникло в результате преодоления трудностей объединения механики и статистики, так как в механике точек нет понятия меры, лежащей в основе статистики.

Введение понятия фазового пространства, отображающего одновременно классический образ частицы и набор различных состояний системы подобных частиц, сталкивается с трудностями топологического происхождения, которые подробно рассмотрены в [11].

Оказалось, что с точки зрения пространства опорных элементов как исходной основы статистики только в частных случаях можно оперировать классическим образом частицы.

По сравнению с понятием фазового пространства пространство опорных элементов отличается: 1) наличием касательного пространства, 2) степенью касания, 3) центрированностью опорных векторов, 4) отсутствием трудностей топологического происхождения в изображении образа частицы, 4) возможностью включать в качестве независимых признаков частицы не только ее координаты и скорости, но и ускорения всех порядков.

Как мы видели в [11], развитие статистических понятий на основе пространства опорных элементов позволило рассматривать концепцию сил не как причину движений, а как ограничение возможных движений, потенциально включенных в самый образ частицы.

Таким образом, с помощью пространства опорных элементов категория движения (центров тяжести частиц) включается на одном уровне первичности с категорией пространства и времени.

Перейдем к определению векторов и тензоров в пространстве опорных элементов. Как всегда, векторы и тензоры определяются по отношению к определенным преобразованиям. Пространство опорных элементов характеризуется преобразованиями (XI.5).

Пусть  $a^\alpha = a^\alpha(x^0, \dots, x^3; u^0, \dots, u^3) \equiv a^\alpha(x^\alpha, u^\alpha)$ , причем каждый элемент зависит, вообще говоря, от всех восьми переменных. Эти элементы будем называть контравариантным вектором, если они будут преобразовываться так же, как вектор скоростей  $u^\alpha$ :

$$a^{\alpha'} = a^\alpha \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha}, \quad (\text{XI.6})$$

и ковариантным вектором, если формулы преобразования имеют

вид

$$a_{\beta'} = a_{\beta} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}}. \quad (\text{XI.7})$$

Составляя простейший тензор  $a^{\alpha} a_{\beta}$ , получаем следующий закон преобразования:

$$a^{\alpha'} a_{\beta'} = a^{\alpha} a_{\beta} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}} \quad (\text{XI.8})$$

или, распространяя этот закон на любые величины  $T_{\beta}^{\alpha} \equiv T_{\beta}^{\alpha}(x^{\alpha}, u^{\alpha})$ , получим

$$T_{\beta'}^{\alpha'} = T_{\beta}^{\alpha} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}}, \quad (\text{XI.9})$$

что позволяет ввести общее определение тензора:

$$T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p} = T_{\beta_1 \dots \beta_q}^{\alpha_1 \dots \alpha_p} \frac{\partial x^{\alpha_1'}}{\partial x^{\alpha_1}} \dots \frac{\partial x^{\alpha_p'}}{\partial x^{\alpha_p}} \frac{\partial x^{\beta_1}}{\partial x^{\beta_1'}} \dots \frac{\partial x^{\beta_q}}{\partial x^{\beta_q'}}. \quad (\text{XI.10})$$

Констатируем следующее обстоятельство: в определении векторов и тензоров не проявляется отличие пространства опорных элементов от координатного пространства обычного тензорного анализа. Это обусловлено тем, что опорные элементы имеют сами тензорную природу, т. е. они логически могут быть введены не до тензоров, а по крайней мере, одновременно с ними. Опорными элементами могут быть не только векторы, но и тензоры любого ранга. Ясно, что в этом случае пространство опорных элементов может быть введено не «до», а «после» введения тензоров. Поэтому естественно, что законы преобразования тензоров связаны только со свойствами координатного пространства. Кроме опорных векторов (и тензоров), могут быть векторы и тензоры, зависящие не только от координат, но и от опорных элементов. В этом случае возникают новые вопросы по отношению к обычному тензорному анализу, о дифференцировании векторов и тензоров по опорным элементам.

Если тензоры вводятся в пространстве опорных элементов так же, как и в координатном пространстве, то иное имеет место для операций дифференцирования.

**Л е м м а 1** (о дифференцировании по «опорным элементам»). Дифференцирование по составляющим опорного вектора, в отличие от дифференцирования по координатам, является тензорной операцией.

Пусть задан тензор  $T_{\beta}^{\alpha} \equiv T_{\beta}^{\alpha}(x^{\alpha}, u^{\alpha})$ , элементы которого зависят от координат и скоростей. По определению

$$T_{\beta'}^{\alpha'} = T_{\beta}^{\alpha} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}}. \quad (\text{XI.11})$$

Продифференцируем по скорости

$$\frac{\partial T_{\beta'}^{\alpha'}}{\partial u^{\gamma'}} = \frac{\partial T_{\beta}^{\alpha}}{\partial u^{\gamma}} \frac{\partial u^{\gamma}}{\partial u^{\gamma'}} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}}; \quad (\text{XI.12})$$

но согласно (XI.6) имеем

$$\frac{\partial u^{\gamma}}{\partial u^{\gamma'}} = \frac{\partial u^{\delta'}}{\partial u^{\gamma'}} \frac{\partial x^{\gamma}}{\partial x^{\delta'}} = \frac{\partial x^{\gamma}}{\partial x^{\gamma'}}. \quad (\text{XI.13})$$

Пользуясь этим, получаем

$$\frac{\partial T_{\beta'}^{\alpha'}}{\partial u^{\gamma'}} = \frac{\partial T_{\beta}^{\alpha}}{\partial u^{\gamma}} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}} \frac{\partial x^{\gamma}}{\partial x^{\gamma'}}, \quad (\text{XI.14})$$

что и указывает на то, что производные тензора по опорному вектору являются также тензором.

Обобщение этой леммы на многократное дифференцирование по элементам опорного вектора и дифференцирование любого тензора — элементарно.

Отметим, что, в принципиальном отличии от дифференцирования по элементам опорных векторов, дифференцирование по координатам не является тензорной операцией. Пусть, для простоты, мы имеем опорный вектор  $u^{\alpha'}$ . Дифференцирование по  $x^{\beta'}$  дает

$$\frac{\partial u^{\alpha'}}{\partial x^{\beta'}} = \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}} + u^{\alpha} \frac{\partial^2 x^{\alpha'}}{\partial x^{\alpha} \partial x^{\beta}} \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\beta'}}. \quad (\text{XI.15})$$

Первый член в (XI.15) является тензорным слагаемым, но второй член — не тензорная добавка, что видно из того, что выражение  $\partial u^{\alpha'}/\partial x^{\beta'}$  не исчезает во всех системах отсчета, если  $\partial u^{\alpha}/\partial x^{\beta} = 0$  в одной из систем координат. Добавка в (XI.15), зависящая от системы координат (функций  $\varphi^{\alpha'}$ ), не содержит производных  $u^{\alpha}$  по координатам и поэтому не обязана обращаться в нуль.

Выясним значение леммы 1 для статистики. В дальнейшем придется иметь дело:

- 1) с четырехмерным координатным пространством

$$x^0 = ct, \quad x^k, \quad k = 1, 2, 3;$$

- 2) с 4-вектором скорости

$$u^0 = \frac{dct}{d\tau}, \quad u^k = \frac{dx^k}{d\tau}, \quad k = 1, 2, 3,$$

причем все восемь величин будут считаться независимыми между собой, описывающими весь спектр возможных значений геометрически-временных и кинематически-временных степеней свободы частиц;

- 3) с функциями распределения  $f(x^{\alpha}, u^{\alpha})$  в пространстве восьми переменных, которые будут играть роль скаляров.

Применяя лемму 1, образуем важный для законов сохранения инвариант

$$\operatorname{div}_u Ff = \frac{\partial}{\partial u^\alpha} F^\alpha f = \operatorname{Inv}, \quad (\text{XI.16})$$

где  $F$  — произвольный 4-вектор.

Таким образом, указанное выражение оказывается ковариантным выражением, т. е. сохраняющим свое определение при преобразованиях вида (XI.5), чего нельзя сказать о дивергенции в пространстве координат

$$\operatorname{div}_r u f = \frac{\partial}{\partial x^\alpha} u^\alpha f \neq \operatorname{Inv}.$$

**Лемма 2** (ковариантное дифференцирование в пространстве опорных элементов по Е. Картану). Если вектор скорости определен вдоль кривой и является опорным элементом, то ковариантный дифференциал и производные вектора  $T^\alpha(x^\sigma, u^\sigma)$ , опорного вектора  $u^\alpha$ , скаляра  $f(x^\sigma, u^\sigma)$  определяются специальным образом, отличным от обычного тензорного анализа Риччи.

Ковариантный дифференциал вводится аксиоматически:

1. Операция дифференциала  $D$  является инвариантной относительно преобразований (XI.5).

2. Ковариантный дифференциал  $D$  является линейной функцией относительно приращений  $dx^\sigma$  и  $du^\sigma$ .

3. Дифференциал суммы и произведения подчиняется обычным правилам.

Из этих аксиом следует

$$DT^\alpha = dT^\alpha + \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha T^\gamma dx^\beta, \quad (\text{XI.17})$$

в частности,

$$Du^\alpha = du^\alpha + \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha u^\gamma dx^\beta. \quad (\text{XI.18})$$

Если ограничиться римановой метрикой в пространстве координат и времени ( $x^\sigma$ ), то коэффициенты  $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha$  будут функциями только  $x^\sigma$  и не зависят от скоростей  $u^\sigma$ . Эти коэффициенты удовлетворяют формулам преобразования

$$\Gamma_{\beta'\gamma'}^{\alpha'} = \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha} \frac{\partial x^\beta}{\partial x^{\beta'}} \frac{\partial x^\gamma}{\partial x^{\gamma'}} + \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial x^{\beta'} \partial x^{\gamma'}} \frac{\partial x^{\alpha'}}{\partial x^\alpha}, \quad (\text{XI.19})$$

а в остальном произвольны.

Форма ковариантного дифференциала определяет выражения ковариантных производных.

1. *Ковариантные производные опорного вектора.* Представим  $Du^\alpha$  в виде

$$Du^\alpha = du^\alpha + \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha u^\gamma dx^\beta \equiv u^\alpha_{;\beta} dx^\beta + u^\alpha_{;\beta} Du^\beta. \quad (\text{XI.20})$$

Отсюда получаем

$$u^{\alpha}_{;\beta} = \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} = 0, \quad u^{\alpha}_{;\beta} = \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial u^{\beta}} = \delta^{\alpha}_{\beta}, \quad (\text{XI.21})$$

т. е. выражения для ковариантных производных опорного вектора. Отметим, что эти производные существенно отличаются от ковариантных производных обычного тензорного анализа:

по Картану

$$D_{\beta} u^{\alpha} = u^{\alpha}_{;\beta} = \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} = 0,$$

по Риччи

$$D_{\beta} u^{\alpha} = \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} + \Gamma^{\alpha}_{\beta\gamma} u^{\gamma} \neq 0.$$

Причиной различия является разная природа вектора скорости в обоих исчислениях. У Картана вектор скорости определен вдоль линии, у Риччи вектор скорости является полемым вектором, т. е. определен в окрестности точки  $x^0, x^1, x^2, x^3$ .

2. Ковариантные производные вектора  $T^{\alpha}(x^{\sigma}, u^{\sigma})$ . Представим ковариантный дифференциал произвольного вектора, являющегося функцией координат  $x^{\sigma}$  и скоростей  $u^{\sigma}$ , в виде

$$DT^{\alpha} = T^{\alpha}_{;\beta} dx^{\beta} + T^{\alpha}_{;\beta} D u^{\beta}. \quad (\text{XI.22})$$

Сравнивая его с исходным представлением (XI.17) и используя выражения полного дифференциала

$$d T^{\alpha} = \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} dx^{\beta} + \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial u^{\sigma}} du^{\sigma}, \quad (\text{XI.23})$$

приходим к выражениям для ковариантных производных вектора  $T^{\alpha}(x^{\sigma}, u^{\sigma})$ :

$$\begin{aligned} T^{\alpha}_{;\beta} &= \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} - \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial u^{\sigma}} \Gamma^{\sigma}_{\beta\gamma} T^{\gamma} + \Gamma^{\alpha}_{\beta\gamma} T^{\gamma}, \\ T^{\alpha}_{;\beta} &= \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial u^{\sigma}} \delta^{\alpha}_{\beta} = \frac{\partial T^{\alpha}}{\partial u^{\beta}}. \end{aligned} \quad (\text{XI.24})$$

3. Ковариантный дифференциал скаляра и ковариантные производные. Пусть  $\varphi(x^{\sigma}, u^{\sigma})$  — скалярная функция восьми переменных. Будем исходить из выражения ковариантного дифференциала (XI.17):

$$D(\varphi T^{\alpha}) = d(\varphi T^{\alpha}) + \Gamma^{\alpha}_{\beta\gamma} \varphi T^{\gamma} dx^{\beta}. \quad (\text{XI.25})$$

На основании аксиомы 3

$$D(\varphi T^{\alpha}) = T^{\alpha} D\varphi + \varphi D T^{\alpha} = T^{\alpha} d\varphi + \varphi (dT^{\alpha} + \Gamma^{\alpha}_{\beta\gamma} T^{\gamma} dx^{\beta}). \quad (\text{XI.26})$$

Отсюда имеем

$$T^\alpha \mathcal{D}\varphi = T^\alpha d\varphi, \quad (\text{XI.27})$$

или, ввиду произвольности вектора  $T^\alpha$ ,

$$\mathcal{D}\varphi = d\varphi. \quad (\text{XI.28})$$

Это дает возможность написать

$$\begin{aligned} \tilde{D}f &= \frac{\partial f}{\partial x^\beta} \frac{dx^\beta}{d\tau} + \frac{\partial f}{\partial u^\sigma} \frac{du^\sigma}{d\tau} = \\ &= \frac{\partial f}{\partial x^\beta} u^\beta + \frac{\partial f}{\partial u^\sigma} \left( \frac{\tilde{D}u^\sigma}{d\tau} + \Gamma_{\beta\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial x^\beta}{d\tau} \right). \end{aligned} \quad (\text{XI.29})$$

Таким образом, ковариантные производные скаляра определяются формулами

$$f_{;\beta} = \frac{\partial f}{\partial x^\beta} - \Gamma_{\beta\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma}, \quad f_{;\beta} = \frac{\partial f}{\partial u^\beta}. \quad (\text{XI.30})$$

В законах сохранения для функций распределения в евклидовом пространстве появляется дивергенция в пространстве координат:  $\text{div}_r u f$ , ее ковариантным обобщением является выражение

$$\widetilde{\text{Div}} u f = u^\alpha \mathcal{D}_\alpha f + f \mathcal{D}_\alpha u^\alpha, \quad (\text{XI.31})$$

где на основании леммы 2

$$\mathcal{D}_\alpha f = \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma}, \quad \mathcal{D}_\beta u^\alpha = 0. \quad (\text{XI.32})$$

Следовательно,

$$\widetilde{\text{Div}} u f = u^\alpha \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\alpha u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma}. \quad (\text{XI.33})$$

Полученное выражение и является ковариантной дивергенцией в четырехмерном пространстве координат с учетом четырехмерности вектора скорости.

Элементом объема в пространстве опорных элементов восьми измерений, инвариантным относительно преобразований (XI.5), является величина

$$\sqrt{-g} dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 \sqrt{-g} du^0 du^1 du^2 du^3, \quad (\text{XI.34})$$

где  $g$  — определитель матрицы  $\|g_{\alpha\beta}\|$  ( $-ds^2 = g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta$ ).

## § 2. Ковариантные статистические уравнения и восьмая степень свободы у частиц

Поставим задачу сформулировать основное статистическое уравнение для функции распределения, зависящей от координат и скоростей частиц, в пространстве опорных элементов, привлекая леммы 1 и 2.

В евклидовом пространстве, в декартовой системе координат и при наличии одного (абсолютного) времени исходные уравнения для электромагнитных взаимодействий, гравитирующих частиц и системы с короткодействием выписаны в главе I и даются формулами (I.19) — (I.21).

На основании лемм 1 и 2 фигурирующее в предыдущих главах уравнение непрерывности

$$\frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_r v f + \operatorname{div}_v \langle \dot{v} \rangle f = 0$$

в пространстве опорных элементов восьми измерений приобретает ковариантную форму

$$\widetilde{\operatorname{Div}}_r u f + \operatorname{div}_v \left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle f = 0, \quad (\text{XI.35})$$

где

$$\widetilde{\operatorname{Div}}_r u f = u^\alpha \widetilde{D}_\alpha f + f \widetilde{D}_\alpha u^\alpha, \quad \widetilde{D}_\alpha f = \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma}, \quad (\text{XI.36})$$

$$\widetilde{D}_\beta u^\alpha \equiv 0, \quad \operatorname{div}_v \left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle f = \frac{\partial}{\partial u^\alpha} \left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle^\alpha f,$$

или в развернутом виде

$$u^\alpha \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma} + \frac{\partial}{\partial u^\alpha} \left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle^\alpha f = 0.$$

В отсутствие действия сил ( $\left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle \equiv 0$ )

$$u^\alpha \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma} = 0; \quad (\text{XI.37})$$

если  $g_{\alpha\beta}$  — фундаментальный метрический тензор римановой геометрии, то

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma = \frac{1}{2} g^{\mu\sigma} \left( \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial g_{\mu\gamma}}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial g_{\alpha\gamma}}{\partial x^\mu} \right). \quad (\text{XI.37}')$$

Ковариантное уравнение для функции распределения в случае электромагнитных взаимодействий приобретает вид

$$\widetilde{\operatorname{Div}}_r u f + \operatorname{div}_u \left\langle \frac{Du}{d\tau} \right\rangle f = 0, \quad (\text{XI.38})$$

$$\left\langle \frac{\widetilde{D}u}{d\tau} \right\rangle = \frac{e}{mc} F_{\beta}^{\alpha} \bar{u}^{\beta}, \quad \frac{\widetilde{D}F^{\alpha\beta}}{\partial x^{\beta}} = \frac{4\pi}{c} e \int u^{\alpha} f \sqrt{-g} d^4u.$$

Ввиду независимости величин  $F^{\alpha\beta}$  от опорных векторов, ковариантная дивергенция тензора в пространстве Картана совпадает с ковариантной дивергенцией в обычном тензорном анализе.

Для гравитационных взаимодействий, привлекая основное уравнение общей теории относительности и выражая правую часть в уравнении гравитации через функцию распределения, имеем

$$\begin{aligned} \widetilde{\text{Div}}_r u f &= u^\alpha \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} - \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma u^\gamma \frac{\partial f}{\partial u^\sigma} = 0, \\ R^{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g^{\alpha\beta} R &= -\kappa \int_{(\infty)} u^\alpha u^\beta f \sqrt{-g} d^4 u \quad (\text{XI.39}) \\ (\kappa &= 8\pi Gm/c^4). \end{aligned}$$

Необходимо отметить разную природу включения в статистические уравнения электромагнитных и гравитационных взаимодействий.

Электромагнитные взаимодействия входят через средние значения ускорения частиц и поэтому требуют наличия функций распределения, зависящих от ускорения, как принципиального момента.

Гравитационные взаимодействия не выходят из рамок инерционных движений в том смысле, что не требуют выхода в пространство ускорений. Их влияние на движение частиц осуществляется параметрически, через метрические коэффициенты  $g_{\alpha\beta}(x^\sigma)$ . Уравнения гравитации выражают эти коэффициенты через моменты функций распределения, которые зависят только от координат и скоростей.

Характерным для ковариантных уравнений является восьмимерное пространство, обязанное новой степени свободы  $u^0 = = dt/d\tau$ .

В релятивистской механике однозначная связь между лабораторным и собственным временем

$$d\tau = (1 - v^2/c^2)^{1/2} dt, \quad \text{I} \quad (\text{XI.40})$$

в более общем случае статистической метрики

$$d\tau = \sqrt{-g_{00}} \sqrt{1 - g_{ik} v_i v_k / c^2} dt \quad (\text{XI.41})$$

и в наиболее общем случае

$$d\tau = ds/c, \quad ds^2 = -g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta \quad (\text{XI.42})$$

обеспечивается неявным отказом от статистического разброса центров тяжести наблюдаемых частиц и их скоростей.

При выводе формулы

$$d\tau = \sqrt{1 - v^2/c^2} dt$$

допускается строгая пространственная локализация положений частицы в исходной системе координат и строгое значение ее скорости в этой системе.

Дальнейшие обобщения не снимают геометрической и кинематической локализации рассматриваемой частицы.

Из определения 4-вектора скорости  $u^\alpha = dx^\alpha/d\tau$ , собственного времени  $d\tau = ds/c$  и фундаментального интервала  $-ds^2 = g_{\alpha\beta}dx^\alpha dx^\beta$  вытекает ограничение на компоненты 4-скорости

$$g_{\alpha\beta}u^\alpha u^\beta = -c^2. \quad (\text{XI.43})$$

Естественно, что формула (XI.43) также включает в себя предположку о локализации положения частицы и ее скорости.

Обычно строят ковариантную статистику на пути сохранения определения собственного времени  $d\tau = ds/c$  и ограничивающей связи  $g^{\alpha\beta}u^\alpha u^\beta = -c^2$ , рассматривая ансамбль из начальных условий частиц в семимерном пространстве.

Однако такое построение приводит к непреодолимым трудностям топологического происхождения, так как число начальных условий представляет собой счетное множество, фазовое же пространство представляет собою многомерный континуум. На основании известной топологической теоремы Брауера между множествами разного числа измерений нельзя установить взаимно однозначного и взаимно непрерывного соответствия. Применяя эту теорему к множеству начальных условий и фазовому пространству, необходимо констатировать противоречие в обычном способе «вывода» статистических уравнений типа Лиувилля — Гиббса из механических уравнений движения, в котором основываются лишь на разбросе начальных условий.

Отказ от геометрической и кинематической локализации частиц как первичных понятий теории снимает указанную трудность.

Введение статистического разброса координат и скоростей как определение самого образа частицы содержит функции распределения безотносительно к требованию существования уравнений движения, основанных на обязательном сохранении локализации.

Отказ от локализации ведет к отказу от связи собственного времени со скоростями частиц и, соответственно, к отказу от двух формул:

$$d\tau = ds/c^2, \quad g_{\alpha\beta}u^\alpha u^\beta = -c^2.$$

Зависимость между собственным и лабораторным временем становится неопределенной, вследствие чего четыре величины,  $u^0, u^1, u^2, u^3$ , становятся равноправными и независимыми степенями свободы, а собственное время освобождается от связи с фундаментальным метрическим интервалом.

Новая степень свободы проявляется в ковариантных уравнениях дополнительным членом.

В выражении ковариантной дивергенции (XI.35) для  $u f$  таким членом является  $\Gamma_{0\gamma}^0 u^0 u^\gamma df/\partial u^0$ .

В условиях статической метрики

$$\frac{\partial g_{\alpha\beta}}{\partial x^0} = 0, \quad g_{0i} = g^{0i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (XI.44)$$

$$\Gamma_{00}^0 = 0, \quad \Gamma_{0i}^0 = \frac{1}{2g_{00}} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^i}$$

новый член не исчезает во всех случаях, в которых

$$\partial g_{00} / \partial x^i \neq 0,$$

причем метрика трехмерного пространства может быть произвольной.

Новый член не исчезает и в четырехмерных пространствах с плоской метрикой. Например, для вращающейся системы отсчета

$$ds_{\#}^2 = (c^2 - \omega^2 r^2) dt^2 - 2\omega r^2 d\varphi dt - dz^2 - r^2 d\varphi^2 - dr^2, \quad \Gamma_{0r}^0 \neq 0,$$

тогда как тензор кривизны  $R_{\gamma, \alpha\beta}^{\alpha} = 0$ .

Появление новой степени свободы  $dct/d\tau$  может быть обусловлено не только отказом от локализации частиц по отношению к координатам и скоростям, но и иными причинами. Например, в области высоких температур можно ожидать нарушения предположения о взаимно однозначном и непрерывном соответствии между показаниями часов лабораторных и собственных на частице. «Часы» на частице могут подвергнуться настолько сильным возмущениям, что ни о какой синхронизации показаний часов лабораторных и собственных уже не может идти речь. В этом случае можно предположить существование статистической независимости в показаниях этих двух типов часов. Возникает задача изучения распределений частиц в случаях реального существования новой степени свободы, не зависящей от значений остальных степеней свободы частиц.

### § 3. Наличие верхней границы температур

Возникают вопросы:

1. В каких явлениях степень свободы  $dct/d\tau$  играет существенную роль?
2. При каком предельном переходе новая степень свободы может исключаться?

Для решения первой задачи рассмотрим решение ковариантного уравнения (XI.35) в условиях

1) стационарности по отношению к лабораторному (но не собственному) времени

$$\partial f / \partial x^0 = 0, \quad \partial g_{\alpha\beta} / \partial x^0 = 0, \quad g_{0i} = g^{0i} = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad (XI.45)$$

2) возможности пренебрежения действием сил, включенных в выражение  $\langle \mathbf{D}u/d\tau \rangle$ ;

3) изотропности распределений в пространстве скоростей.

Из условий стационарности и определения  $\Gamma_{\beta\gamma}^{\alpha}$  — тензора Кристоффеля (XI.37') — следует

$$\Gamma_{00}^0 = \Gamma_{ik}^0 = \Gamma_{i0}^k = 0, \quad \Gamma_{0i}^0 = \frac{1}{2g_{00}} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^i}, \quad \Gamma_{00}^i = -\frac{1}{2} g^{ik} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^k}. \quad (\text{XI.46})$$

Подстановка в уравнение  $\widetilde{\text{Div}}_r u f = 0$  дает

$$u^i \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} - 2\Gamma_{0i}^0 u^0 \frac{\partial f}{\partial u^0} \right) - (\Gamma_{kl}^i u^k u^l + \Gamma_{00}^i (u^0)^2) \frac{\partial f}{\partial u^i} = 0. \quad (\text{XI.47})$$

Удобно вывести следующие трехмерные компоненты скорости:

$$\xi^i = \frac{u^i}{\sqrt{-g_{00}u^0}} = \frac{dx^i/dt}{c\sqrt{-g_{00}}},$$

и искать решения (XI.47) в виде

$$f(x^i, u^\alpha) \rightarrow f(x^i, \xi^i, u^0). \quad (\text{XI.48})$$

Компоненты скоростей  $\xi^i$  не зависят от собственного времени, последнее входит только в  $u^0$ . При переходе к новым переменным  $x^i, \xi^i, u^0$  необходимо учесть

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x^i} &= \frac{\partial f}{\partial x^i} + \frac{\partial f}{\partial \xi^k} \frac{\partial \xi^k}{\partial x^i}, & \frac{\partial \xi^k}{\partial x^i} &= -\frac{\xi^k}{2g_{00}} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^i}, \\ \frac{\partial f}{\partial u^i} &= \frac{\partial f}{\partial \xi^k} \frac{\partial \xi^k}{\partial u^i}, & \frac{\partial \xi^k}{\partial u^i} &= \frac{\delta_i^k}{\sqrt{-g_{00}u^0}}, \\ \frac{\partial f}{\partial u^0} &= \frac{\partial f}{\partial u^0} + \frac{\partial f}{\partial \xi^i} \frac{\partial \xi^i}{\partial u^0}, & \frac{\partial \xi^i}{\partial u^0} &= -\frac{\xi^i}{u^0}. \end{aligned} \quad (\text{XI.49})$$

■ После подстановки в исходное уравнение новых переменных получаем

$$\begin{aligned} \xi^i \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^i} \xi^k \frac{\partial f}{\partial \xi^k} - \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^i} u^0 \frac{\partial f}{\partial u^0} \right) - \\ - \left( \Gamma_{kl}^i \xi^k \xi^l - \frac{1}{2} g^{ik} \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^k} \right) \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = 0. \end{aligned} \quad (\text{XI.50})$$

Будем искать решение в виде функции распределения, изотропно зависящей от скоростей  $\xi^i$ :

$$f(x^i, \xi^i, u^0) \rightarrow f(x^i, g_{kl} \xi^k \xi^l, u^0), \quad g_{kl} \xi^k \xi^l = \xi^2. \quad (\text{XI.51})$$

При этом необходимо учесть:

$$\frac{\partial f}{\partial x^i} = \frac{\partial f}{\partial x^i} + \frac{\partial f}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi^2}{\partial x^i}, \quad \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = \frac{\partial f}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi^2}{\partial \xi^i}, \quad \frac{\partial \xi^2}{\partial \xi^i} = 2g_{im}\xi^m. \quad (\text{XI.52})$$

Так как  $2\Gamma_{kl}^i \xi^k \xi^l g_{im} \xi^m = \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^m} \xi^k \xi^l \xi^m$ , то имеет место равенство следующих членов в уравнении:

$$\xi^i \frac{\partial f}{\partial \xi^2} \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^i} \xi^k \xi^l = \Gamma_{kl}^i \xi^k \xi^l \frac{\partial f}{\partial \xi^2} 2g_{im} \xi^m. \quad (\text{XI.53})$$

Далее

$$\begin{aligned} \xi^k \frac{\partial f}{\partial \xi^k} &= \frac{\partial f}{\partial \xi^2} 2g_{km} \xi^k \xi^m = \frac{\partial f}{\partial \xi^2} 2\xi^2, \\ -\frac{1}{2} g^{ik} \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^k} \frac{\partial f}{\partial \xi^i} &= -\frac{1}{2} g^{ik} \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^k} \frac{\partial f}{\partial \xi^2} 2g_{im} \xi^m = \\ &= -\delta_m^k \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^k} \frac{\partial f}{\partial \xi^2} \xi^m = -\frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^i} \frac{\partial f}{\partial \xi^2} \xi^i. \end{aligned} \quad (\text{XI.54})$$

Окончательно получаем

$$\xi^i \left( \frac{\partial f}{\partial \xi^i} + \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^i} (\xi^2 - 1) \frac{\partial f}{\partial \xi^2} - \frac{\partial \ln g_{00}}{\partial x^i} u^0 \frac{\partial f}{\partial u^0} \right) = 0. \quad (\text{XI.55})$$

1. Это уравнение оказалось нечувствительным к метрике трехмерного пространства координат, так как элементы метрического тензора  $g_{ik}$ ,  $i, k = 1, 2, 3$ , выпали при переходе к новым переменным.

2. Оно позволяет получить информацию о распределениях частиц по  $\xi^2$  и  $u^0$  при условии

$$\frac{1}{g_{00}} \frac{\partial g_{00}}{\partial x^i} \neq 0,$$

хотя амплитуда этой зависимости может быть сколь угодно малой.

Для получения решения применим принцип максимальной статистической независимости распределений по отношению к входящим трем группам величин  $x^1, x^2, x^3$ ;  $\xi^2$  и  $u^0$ . Этот принцип, как мы видели ранее, выделяет температурные распределения.

Полагаем

$$f(x^i, \xi^2, u^0) = \rho(r) w(\xi^2) w_0(u^0). \quad (\text{XI.56})$$

Учитывая, что  $u^0$  является независимой переменной, имеем

$$\frac{\partial \ln \rho / \partial x^i}{\frac{1}{2} mc^2 \partial \ln g_{00} / \partial x^i} + (\xi^2 - 1) \frac{\partial \ln w}{\partial \xi^2} \frac{2}{mc^2} - \frac{2}{mc^2} \frac{\partial \ln w_0}{\partial u^0} u^0 = 0; \quad (\text{XI.57})$$

при этом мы умножили все члены на фактор  $(mc^2/2)^{-1}$ . Разделяя переменные и вводя постоянные  $\theta$  и  $\theta_{кр}$ , получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \rho / \partial x^i}{\frac{1}{2} mc^2 \partial \ln g_{00} / \partial x^i} &= -\frac{1}{\theta}, \quad i = 1, 2, 3, \\ -\frac{2 \partial \ln w_0}{mc^2 \partial u^0} u^0 &= \frac{1}{\theta_{кр}}, \quad (\xi^2 - 1) \frac{\partial \ln w}{\partial \xi^2} \frac{2}{mc^2} = \frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}. \end{aligned} \quad (XI.58)$$

Решениями этих уравнений являются

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \rho_0 (-g_{00})^{-mc^2/2\theta}, \\ w(\xi^2) &= w(0) \left(1 - \xi^2\right)^{\frac{mc^2}{2} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}\right)}, \\ w_0(u^0) &= w_0(0) \frac{1}{(u^0)^{mc^2/2\theta_{кр}}}. \end{aligned} \quad (XI.59)$$

Вводим ритм времени лабораторных часов, зависящий от коэффициента  $g_{00}$ :

$$dt' = \sqrt{-g_{00}} dt, \quad (XI.60)$$

тогда

$$\xi^2 = g_{ik} \frac{u^i u^k}{\sqrt{-g_{00}} u^0 \sqrt{-g_{00}} u^0} = \frac{g_{ik} dx^i dx^k}{c^2 (dt')^2} = \frac{v^2}{c^2}, \quad (XI.61)$$

где  $v$  — скорость частиц в лабораторной системе отсчета; распределение частиц по скоростям, воспринимаемое наблюдателем, с указанными часами есть

$$w(v^2) = w(0) \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{mc^2}{2} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}\right)}. \quad (XI.62)$$

Это распределение уже не зависит (явно) от метрического коэффициента  $g_{00}$ , и поскольку оно не зависит также и от остальных коэффициентов, оно приобретает универсальный характер, равноправный с классическим распределением по скоростям Максвелла.

1. Предполагая

$$\frac{v^2}{c^2} \ll 1, \quad \theta < \theta_{кр}$$

и пользуясь известным пределом, определяющим число  $e$ :

$$\lim_{|x| \rightarrow 0} (1 - |x|)^{-\frac{1}{|x|}} = \lim_{x \rightarrow +0} (1 + x)^{1/x} = e,$$

имеем

$$\lim_{c \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{mc^2}{2} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}\right)} = e^{-\frac{mv^2}{2} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}\right)} \quad (XI.63)$$

$(\theta_{кр} > \theta),$

что дает максвелловское распределение с поправкой на температуру

$$\frac{1}{\theta} \rightarrow \frac{1}{\theta} \left( 1 - \frac{\theta}{\theta_{кр}} \right), \quad \frac{\theta}{\theta_{кр}} < 1.$$

2. Если  $\theta > \theta_{кр}$ , показатель  $\frac{mc^2}{2} \left( \frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}} \right)$  меняет знак, функция  $w(v^2)$  становится не убывающей, а возрастающей с ростом скоростей.

Нарушение нормировки распределения частиц по скоростям, при достижении параметром  $\theta$  критического значения  $\theta_{кр}$ , естественно интерпретировать как «взрыв» системы частиц.

Следующие теоретические предпосылки привели к наличию взрыва:

1) существование новой степени свободы у частиц  $u^0 = dct/d\tau$ , так как при  $\theta_{кр} \rightarrow \infty$  зависимость от  $u^0$  функции распределения

$$w_0(u^0) = w_0(0) \frac{1}{(u^0)^{mc^2/2\theta_{кр}}} \quad (\text{XI.64})$$

пропадает;

2) существование температурных распределений вида (XI.56) как результата статистической независимости между распределениями по координатам, скоростям и по значениям новой степени свободы;

3) существование метрического коэффициента  $g_{00}$  как функции координат:

$$\frac{\partial g_{00}}{\partial x^i} \neq 0.$$

От метрики трехмерного пространства координат наличие взрыва не зависит.

Функция распределения по координатам в (XI.59)  $\rho(r)$ , если предположить, что

$$-g_{00} = 1 + \frac{2U}{mc^2}, \quad (\text{XI.65})$$

где  $U$  — потенциальная энергия частицы, при  $2U/mc^2 \ll 1$  также переходит в больцмановское распределение

$$\rho(r) = \rho_0 e^{-U/\theta}. \quad (\text{XI.66})$$

Функция распределения по значениям новой переменной  $u^0$  в (XI.59)  $w_0(u^0)$  выпадает из рассмотрения при переходе к классическому распределению, если предположить, что поправка, зависящая от  $\theta_{кр}$ , стремится к нулю:

$$1 - \frac{\theta}{\theta_{кр}} \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad \theta_{кр} \rightarrow \infty.$$

Возникают вопросы: какие наблюдаемые явления связаны с разбросом  $u^0$  и существованием критической температуры? Можно ли оценить значение критической температуры?

#### § 4. Распределение частиц по энергиям в космических лучах при достижении верхней границы температур

Рассмотрим функцию распределения частиц в состоянии взрыва, когда температурный параметр  $\theta$  достигает критического значения  $\theta_{кр}$ . В этом случае скоростная часть функции распределения, зависящая от скоростей, становится постоянной величиной:

$$\lim w(v^2) = \lim_{\theta \rightarrow \theta_{кр}} w(0) \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{mc^2}{2\theta} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_{кр}}\right)} = w(0), \quad (XI.67)$$

и, таким образом, перестает быть нормированной.

В этих условиях частицы распределяются только по оставшимся степеням свободы  $x^k, u^0, k = 1, 2, 3$ :

$$f(x^1, x^2, x^3, u^0) = C (-g_{00})^{-mc^2/2\theta_{кр}} \frac{1}{(u^0)^{mc^2/2\theta_{кр}}}. \quad (XI.68)$$

Возникает вопрос: каково будет поведение частиц, описываемых этой функцией, если они, покинув область взрыва, попадают в условия взаимодействия с веществом, не находящимся в состоянии взрыва? Переход должен сопровождаться редукцией от крайнего состояния статистической независимости новой степени свободы  $u^0$  от остальных степеней свободы частиц к другому крайнему случаю — пространственной и энергетической локализации частицы, обеспечивающей аналитическую независимость между лабораторным и собственным временем.

Аналитическая связь между всеми компонентами 4-вектора скорости определяется формулой

$$g_{\alpha\beta} u^\alpha u^\beta = -c^2,$$

откуда

$$u^0 = \frac{1}{\sqrt{-g_{00}}} (\sigma_i u^i + \sqrt{c^2 + \sigma_{ik} u^i u^k}), \quad (XI.69)$$

$$\sigma_i = \frac{g_{0i}}{\sqrt{-g_{00}}}, \quad \sigma_{ik} = g_{ik} + \sigma_i \sigma_k \quad (i, k = 1, 2, 3).$$

В случае статической метрики  $g_{0i} = 0$

$$u^0 = \frac{\sqrt{c^2 + u^2}}{\sqrt{-g_{00}}}, \quad u^2 = g_{ik} u^i u^k.$$

Для редукции необходимо перейти от спектра значений степени свободы  $u^0$  в формуле (XI.68) к вполне определенному значению  $u^0$ :

$$u^0 = \frac{\sqrt{c^2 + u^2}}{\sqrt{-g_{00}}} > 0. \quad (\text{XI.70})$$

Эта процедура осуществляется интегрированием функции  $f(x^i, u^0)$  с использованием  $\delta$ -функции Дирака:

$$\int f(x^i, u^0) \delta\left(u^0 - \frac{\sqrt{c^2 + u^2}}{\sqrt{-g_{00}}}\right) du^0. \quad (\text{XI.71})$$

После редукции представляется возможным использовать выражение энергии частицы из релятивистской механики

$$\varepsilon = mc^2 (-g_{00}) \frac{u^0}{c}; \quad (\text{XI.72})$$

интеграция приводит к степенному спектру энергий

$$f(\varepsilon) = f_0 \frac{1}{\varepsilon^\gamma}, \quad \gamma = \frac{mc^2}{2\theta_{кр}}. \quad (\text{XI.73})$$

который можно отождествить с распределением энергии частиц в космических лучах. Здесь  $f_0$  — постоянная, которая должна определиться из дополнительной нормировки,  $\gamma$  — характерный показатель распределения. Степенной спектр выводился как решение ковариантных уравнений в работах [21, 22]. Здесь вывод основан на теории взрыва системы частиц при достижении температурного параметра верхней критической границы.

## § 5. Численная оценка верхней границы температур

При переходе от функции распределения  $f(\varepsilon)$  к гидродинамическим величинам

$$J^\alpha = \int u^\alpha f d\omega, \quad T^{\alpha\beta} = \int u^\alpha u^\beta f d\omega$$

при интегрировании надо учитывать связь между  $u^0$  и  $u^k$ ,  $k = 1, 2, 3$ ,  $g_{\alpha\beta} u^\alpha u^\beta = -c^2$ , которая использовалась при выводе самой функции распределения (XI.73). Элемент «объема» гиперсферы в пространстве скоростей есть

$$d\omega = \frac{\sqrt{-g_{00}}}{c^2 u_0} \sqrt{\sigma} du^1 du^2 du^3, \quad (\text{XI.74})$$

поскольку в статической метрике  $u_0 = \sqrt{-g_{00}} \sqrt{c^2 + u^2}$

$$d\omega = \frac{\sqrt{\sigma} du^1 du^2 du^3}{c^2 \sqrt{c^2 + u^2}}, \quad (\text{XI.75})$$

где  $\sigma$  — детерминант метрического тензора трехмерного пространства. На основании изотропности функции распределения по скоростям введем сферическую систему координат

$$\int (\dots) \sqrt{\sigma} du^1 du^2 du^3 = 4\pi \int (\dots) u^2 du, \quad (\text{XI.76})$$

где  $u = \sqrt{\gamma_{ik} u^i u^k}$  — длина трехмерного вектора  $u^i$ . Благодаря изотропности распределения скоростей отличными от нуля компонентами  $J^\alpha$  и  $T_\beta^\alpha$  являются следующие величины:

$$J^0 = N, \quad T_0^0 = E, \quad T_1^1 = T_2^2 = T_3^3 = \mathcal{P}, \quad (\text{XI.77})$$

т. е. концентрация, плотность энергии и давление. Используя выражение для степенной функции распределения, выражение «объема» четырехмерной псевдосферы в пространстве скоростей и сферические координаты, получаем:

$$\begin{aligned} N &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-(\gamma+1)/2} \cdot 4\pi \int_0^\infty \xi^2 (1 + \xi^2)^{-\gamma/2} d\xi, \\ E &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-\gamma/2} mc \cdot 4\pi \int_0^\infty \xi^2 (1 + \xi^2)^{-\gamma/2+1/2} d\xi, \\ \mathcal{P} &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-\gamma/2} mc^2 \cdot \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \xi^4 (1 + \xi^2)^{-\gamma/2+1/2} d\xi. \end{aligned} \quad (\text{XI.78})$$

Используя интеграл из теории  $\Gamma$ -функций

$$2 \int_0^\infty \frac{(\eta^2)^{x-1/2} d\eta}{(1 + \eta^2)^{x+y}} = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \quad R_x > 0, \quad R_y > 0,$$

получаем

$$\begin{aligned} N &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-(\gamma+1)/2} \cdot 4\pi \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \frac{\Gamma(\gamma/2 - 3/2)}{\Gamma(\gamma/2)}, \\ E &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-\gamma/2} mc \cdot 4\pi \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \frac{\Gamma(\gamma/2 - 2)}{\Gamma(\gamma/2 - 1/2)}, \\ \mathcal{P} &= \frac{f_0}{(mc^2)^\gamma} (-g_{00})^{-\gamma/2} mc^2 \cdot 4\pi \frac{1}{6} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \frac{\Gamma(\gamma/2 - 2)}{\Gamma(\gamma/2 + 1/2)}. \end{aligned} \quad (\text{XI.79})$$

Сходимость интегралов требует выполнения условия

$$y = \frac{\gamma}{2} - 2 > 0 \quad \left( \gamma = \frac{mc^2}{2\theta_{\text{кр}}} \right); \quad (\text{XI.80})$$

это дает верхнюю границу для критической температуры

$$\theta_{кр} < mc^2/8, \quad (XI.81)$$

где  $m$  — покоящаяся масса частиц,  $c$  — скорость света; для электронов  $T_{кр} < 7,4 \cdot 10^8$  °К, для протонов  $T_{кр} = 13,3 \cdot 10^{11}$  °К.

Попробуем получить оценку величины  $\theta_{кр}$  из других соображений. До перехода к редукции функции распределения, связанной с локализацией частиц, мы имеем  $w_0(u^0)$  согласно (XI.59). Для температур  $\theta < \theta_{кр}$  функция распределения по переменным  $v^2$  и  $u^0$  должна быть нормированной, что ведет к ограничению значений  $\theta_{кр}$ .

Величина  $u^0 = dct/dx$  с ростом «хаоса» может только увеличиться по сравнению со случаем идеальной синхронизации ( $dx = dt$ ); так как с ростом хаоса величина области  $\Delta t$ , внутри которой существует определенное значение производной, может только уменьшаться, то  $c \leq u^0 < \infty$ .

В пространстве восьми измерений инвариантный объем равен  $\sqrt{-g} d^4x \sqrt{-g} d^4u$ ; в переменных  $\xi^i$  и  $u^0$ :  $\xi^i = \frac{u^i}{\sqrt{-g_{00}u^0}}$ ,  $u^0$ , объем в пространстве скоростей пропорционален  $d^3\xi (u^0)^3 du^0$ .

Требование нормировки по  $u^0$  приводит к неравенству

$$\int_c^\infty (u^0)^{-\gamma+3} du^0 < \infty, \quad \gamma = \frac{mc^2}{2\theta_{кр}}, \quad (XI.82)$$

которое имеет место, если  $\theta_{кр} < mc^2/8$ , что совпадает с прежним результатом.

Поставим задачу вывести из экспериментальных данных по энергетическому спектру космических лучей величину  $\theta_{кр}$ .

Экспериментальные наблюдения интенсивности космических лучей дают возможность определить их концентрацию. На основании релятивистского выражения абсолютной величины скорости частиц  $v = c \sqrt{1 - (mc^2/\epsilon)^2}$  имеем

$$N = 4\pi \int_{m:c}^\infty \frac{1}{v} I(\epsilon) d\epsilon, \quad (XI.83)$$

где  $I(\epsilon)$  — опытная функция интенсивности космических излучений.

Теоретическую формулу для концентрации частиц

$$N = 4\pi \int_0^\infty f(u) u^2 du \quad (XI.83')$$

$$f(\epsilon) = f_0/\epsilon^\gamma, \quad \epsilon = mc^2 \sqrt{1 + u^2/c^2},$$

которая дается нулевой компонентой 4-вектора плотности тока

$$J^{\alpha} = \int u^{\alpha} f \frac{\sqrt{-g} d^3u}{u^0}, \quad (\text{XI.84})$$

можно представить в форме, которую используют экспериментаторы, основываясь на связи между величиной модуля трехмерной скорости частиц  $u^2 = \sigma_{ik} u^i u^k$  и энергией частиц в условиях локализации:

$$u^2 = c^2 [(\epsilon/mc^2)^2 - 1], \quad du = d\epsilon/vm,$$

где  $v = c \sqrt{1 - (mc^2/\epsilon)^2}$ . Имеем

$$N = \frac{4\pi c}{m} \int_{mc^2}^{\infty} \left( \frac{\epsilon}{mc^2} \right)^2 f \frac{v}{c} d\epsilon. \quad (\text{XI.85})$$

Сопоставляя (XI.85) с формулой (XI. 83), содержащей выражение интенсивности, находим

$$I(\epsilon) = \left( \frac{\epsilon}{mc^2} \right)^2 \frac{v^2}{m} f(\epsilon) = \frac{c^2}{m} \left[ \left( \frac{\epsilon}{mc^2} \right)^2 - 1 \right] f(\epsilon). \quad (\text{XI.86})$$

Учитывая, что для космических частиц  $\epsilon \gg mc^2$ , и удерживая главный член, получаем

$$I(\epsilon) = \frac{c^2}{m} \left( \frac{\epsilon}{mc^2} \right)^{\gamma} f(\epsilon) = \frac{A}{\epsilon^{\tilde{\gamma}}}, \quad \tilde{\gamma} = \frac{mc^2}{2\theta_{\text{кр}}} - 2, \quad (\text{XI.87})$$

где постоянная  $A$  пропорциональна концентрации частиц. Из экспериментальных данных для протонов следует  $\gamma \approx 2,5$ , это приводит к оценке величины  $\theta_{\text{кр}}$ :

$$\theta_{\text{кр}} \approx mc^2/9, \quad (\text{XI.88})$$

что оказывается близким к верхней теоретической границе

$$\theta_{\text{кр}} < mc^2/8.$$

В итоге рассмотрения этой главы приходим к следующим заключениям:

1. Наиболее естественным способом описания поведения частиц, свободным от ограничений локализации и целочисленности, является аппарат статистических функций распределения в так называемом пространстве опорных элементов, приспособленном для координат времени, скоростей и ускорений.

2. Ковариантные статистические законы сохранения для этих функций в указанном пространстве удается сформулировать, используя дифференциальное исчисление Картана. Законы сохранения и сами функции распределения приспособлены для произвольной метрики пространства-времени.

3. Отказ от локализации частиц как первичного понятия ведет к новой кинематической степени свободы частиц, так как остается произвольной связь между лабораторным и собственным временем у частиц. Пространство опорных элементов является принципиально восьмимерным, если не привлекать зависимость от ускорений.

4. Новая степень свободы в температурных распределениях частиц приводит к обобщению классического распределения Максвелла — Больцмана.

Характерным свойством полученного распределения является наличие критической температуры, при достижении которой нарушается нормировка распределения по скоростям. Преобладание в спектре больших значений скоростей частиц естественно интерпретировать как наличие взрывного процесса в системе частиц особой природы, связанного с существованием четвертой кинематической степени свободы частиц.

5. Для существования взрывных процессов (соответственно критической температуры) требуется, помимо новой степени свободы, наличие определенной неоднородности: зависимости метрического коэффициента  $-g_{00}$  (у временной переменной) от пространственных координат. Но эта зависимость необходима лишь в принципе, — от степени неоднородности существование и величины критической температуры не зависят.

Другие метрические коэффициенты не участвуют в выводе температурного распределения, поэтому результаты остаются в силе и в пространствах с плоской трехмерной метрикой.

6. Решается вопрос: каково будет поведение системы частиц при достижении критической температуры, если часть из них, покинув область взрыва, попадает в условия взаимодействия с веществом, не находящимся в состоянии взрыва?

Естественный переход исходных функций распределения без локализации в новые функции с кинематической локализацией частиц исключает четвертую кинематическую степень свободы частиц. Этот процесс редукции приводит к степенному распределению частиц по энергиям, соответствующему энергетическому спектру космических лучей.

7. Из требования конечности первых моментов от функции распределения после редукции получается определение верхней границы для критической температуры взрыва ( $\theta_{кр} < mc^2/8$ ). Эта величина определяет эмпирическое значение показателя степенного спектра энергий космических лучей. С другой стороны, теория позволяет вычислить  $\theta_{кр}$  из экспериментальных данных. Полученная величина  $mc^2/9$  близка к теоретической верхней границе.

1. *М. Борн, Х. Кунь*, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.
2. *E. Cartan*, Les espaces de Finsler, Paris, 1934.
3. *А. А. Власов*, Обобщение концепции электронной плазмы, Изв. АН СССР 8, № 5, 248 (1944).
4. *А. А. Власов*, К теории твердого тела, Уч. зап. МГУ, часть физ., вып. 75, 3 (1945).
5. *А. А. Власов*, К обобщенной теории плазмы и теории твердого тела, Вестн. МГУ, часть физ., № 3—4 (1946).
6. *А. А. Власов*, Новое содержание задачи многих частиц, ЖЭТФ 18, 840 (1948).
7. *А. А. Власов*, Теория многих частиц, Гостехиздат, 1950.
8. *А. А. Власов, В. А. Яковлев*, О теории кристаллического состояния, ЖЭТФ 20, 1109 (1950).
9. *А. А. Власов*, О переносе массы и заряда поверхностными волнами, ЖЭТФ 27, вып. 2, 224 (1954).
10. *А. А. Власов*, О пространственно-неоднородных распределениях системы гравитирующих частиц, Вестн. МГУ, физ., астр., № 4, 95 (1957).
11. *А. А. Власов*, Статистические функции распределения, «Наука», 1966.
12. *А. А. Власов*, Нитевидные и пластинчатые структуры в кристаллах и жидкостях, ТМФ 5, вып. 3, 388 (1970).
13. *А. А. Власов, В. Н. Кураев*, Теория каналирования и эффекта теней в статистической модели кристалла, Вестн. МГУ, физ., астр., № 3, 328 (1972); № 4, 471 (1972); № 4, 431 (1972).
14. *А. А. Власов, К. И. Волянский*, О теории звуковых волн в динамической и статистической моделях кристалла, Вестн. МГУ, № 4, 467 (1973).
15. *А. А. Власов, К. И. Волянский, А. Б. Мозольков*, Новый механизм распространения звука в кристаллах, Труды Всесоюзн. акустической конференции, Москва, 1973.
16. *А. А. Власов, К. И. Волянский, В. Г. Трофимов*, Существование акустического ветра в кристаллах, Труды Всесоюзн. акуст. конф., 1973, Москва, 1974.
17. *В. А. Головкин*, Нелинейные эффекты при распространении волн в статистических средах, ЖЭТФ 47, вып. 5, 1975 (1964).
18. *В. А. Головкин*, Некоторые вопросы статистической теории кристалла, Вестн. МГУ, физ., астр., № 4, 62 (1967).
19. *В. А. Головкин*, Исследование волн в кристаллах при условиях, близких к условиям кристаллизации, с помощью уравнения Власова, Вестн. МГУ, физ., астр., № 2, 85 (1967).
20. *Н. Н. Зряков, А. Б. Мозольков*, Границы устойчивости пространственно-однородного распределения в системе частиц для потенциала взаимодействия, имеющего яму, Вестн. МГУ, физ., астр., № 2, 116 (1970).
21. *А. Н. Гордеев*, Степенной энергетический спектр космических лучей как решение общеквариантного кинетического уравнения, Астр. ж. 43, вып. 5, 1030 (1966).
22. *П. Б. Подосенков*, О степенной и экспоненциальной функциях распределения, Вестн. МГУ, физ., астр., № 2, 195 (1970).
23. *Р. Балеску*, Статистическая механика заряженных частиц, «Мир», 1967.

24. *J. H. Oort*, Dynamics of the Galactic System in the vicinity of sun, *Bull. Astron. Netherl.* 4, № 159, 269 (1928).
25. *F. E. Simon, G. Catrer*, *Z. anorg. u. allgem. Chem.* 178, 309 (1929).
26. *И. Д. Ван дер Ваальс, К. Констамм*, Курс термостатики, ч. I, ОНТИ, 1936.
27. *S. E. Vabbh*, Parameters in the Simon equation, *Rev. Mod. Phys.* 35, 400 (1963).
28. «Discussion on the first and second viscosities of fluids», *Proc. Roy. Soc. A226*, 1 (1954).
29. *М. И. Агрест, М. З. Максимов*, Теория неполных цилиндрических функций и их приложения, Атомиздат, 1965.
30. *М. Томпсон*, Канализование частиц в кристаллах, УФН 99, вып. 2, 297 (1969).
31. *А. Ф. Тулимов*, Влияние кристаллической решетки на некоторые атомные и ядерные процессы, УФН 4, 585 (1965).
32. *G. K. Wehner*, *J. Appl. Phys.* 26, 1056 (1955).
33. *В. Е. Дубинский, С. Я. Лебедев*, Особенности углового распределения [распыляемого материала при бомбардировке монокристаллов ионами, ФТТ 12, вып. 7, 1906 (1970)].
34. *А. Гинье*, Рентгенография кристаллов, Физматгиз, 1961.
35. *J. B. Bernstein, E. A. Frimen, M. D. Kruskel, R. M. Kulsrud*, *Proc. Roy. Soc. A224*, 17 (1958).
36. *В. А. Варданян*, Некоторые вопросы теории устойчивости пространственно-ограниченных образований, канд. дисс., МГУ, 1965.
37. *Дж. Займан*, Современная квантовая теория, «Мир», 1970; Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966.
38. *S. Singer*, The nature of ball lightning, Plenum press, New York, 1971.
39. *П. Л. Капица*, Свободный плазменный шнур в высокочастотном поле при высоком давлении, ЖЭТФ 57, 1801 (1969).
40. *M. Kruskel, M. Schwarzschild*, Some instabilities of a completely ionised plasma, *Proc. Roy. Soc. A223*, 348 (1954).
41. *D. D. Caspar, A. Klug*, Cold spring Harbor simposia on quantitative biology, vol. XXVIII, 1971.
42. *A. J. Schlüter*, *Fluids mech.* 23, 129 (1965).

От Издательства . . . . .	3
Предисловие . . . . .	4
<b>Глава I. Основы статистической механики системы частиц без предположений об их локализации и целочисленности</b>	<b>5</b>
§ 1. Функции распределения, зависящие от координат, скоростей и ускорений как первичные понятия теории	5
§ 2. Взаимодействия как связь (ограничение) вероятных значений кинематических и геометрических величин, характеризующих частицы . . . . .	8
§ 3. Случаи точных решений нелокально-статистических уравнений . . . . .	12
<b>Глава II. Нелокально-статистическая модель кристалла . . . .</b>	<b>29</b>
§ 1. Пространственно-периодические решения для вероятностей местоположения частиц при достаточно низких и промежуточных температурах . . . . .	29
§ 2. Определение пространственного периода, температурного разброса и энергии связи атомов в кристалле . . .	36
§ 3. Анизотропия распределения вероятностей местоположения атомов в междоузлиях . . . . .	40
§ 4. Подход к теории кривых плавления Симона . . . . .	44
<b>Глава III. Нитевидные и пластинчатые структуры в кристаллах</b>	<b>49</b>
§ 1. Существование и свойства нитевидных структур . . .	49
§ 2. Существование и свойства пластинчатых структур . . .	55
§ 3. Устойчивость возбужденных состояний кристалла . .	60
<b>Глава IV. Новый механизм распространения звука в кристаллах</b>	<b>75</b>
§ 1. Связь теории упругости с динамической теорией решетки . . . . .	75
§ 2. Термодинамика для статистической модели кристалла. Определение скорости звука. Связь между микро- и макросмещениями . . . . .	78
§ 3. Механизм, скорость и затухание звука на основе временного уравнения для функции распределения . . . .	82
§ 4. Пространственная модуляция акустических волн периодической структурой кристалла . . . . .	89
<b>Глава V. Существование акустического ветра в кристаллах . . . .</b>	<b>99</b>
§ 1. Постановка проблемы и метод решения . . . . .	99
§ 2. Первое приближение для акустического поля при наличии источника акустических волн . . . . .	101

§ 3. Особенности нелинейного механизма в акустическом поле. Второе приближение для акустического поля	105
§ 4. Существование акустического ветра в кристаллах и его свойства . . . . .	108
§ 5. Акустический ветер в пространственно-однородной среде, без наличия источников . . . . .	111
<b>Глава VI. Единая теория явлений каналирования, эффекта теней и пятен Венера, при прохождении частиц через монокристаллы . . . . .</b>	<b>116</b>
§ 1. Постановка проблемы и метод решения . . . . .	116
§ 2. Пространственная структура в распределении концентрации рассеянных частиц, прошедших через кристалл	121
§ 3. Вычисление некоторых интегралов . . . . .	126
§ 4. Теория каналирования и эффекта теней на возбужденных состояниях кристалла . . . . .	132
§ 5. Температурные распределения в пучке при наличии возбужденных структур . . . . .	136
§ 6. Общность природы пятен Венера и блокировочного эффекта (при прохождении частиц через монокристаллы)	142
§ 7. Непрерывный переход явления пятен Венера в эффект блокировки (при увеличении кинетической энергии частиц, проходящих через монокристалл) . . . . .	146
<b>Глава VII. Применение нелокально-статистической теории к рентгеноструктурному анализу кристаллов . . . . .</b>	<b>154</b>
§ 1. Объединение полей — дифракционного для рентгеновского рассеяния и статистического для функций распределения атомов в кристалле . . . . .	154
§ 2. Условия Брегга — Вульфа, фактор Дебая — Валлера и диффузное рассеяние в нелокальной модели кристалла	158
§ 3. Теоремы о «штабах» . . . . .	163
<b>Глава VIII. Взаимодействие ионов в холодной плазме через промежуточную систему (нейтральный газ) . . . . .</b>	<b>172</b>
§ 1. Матричный элемент взаимодействия через промежуточную систему . . . . .	172
§ 2. Характеристики акустического поля в нейтральном газе в нелокально-статистической теории . . . . .	175
§ 3. Определение функционального вида энергии взаимодействия ион — ион через акустическое поле в нейтральном газе . . . . .	184
<b>Глава IX. Теория существования и устойчивости плазмоидов, удерживающихся собственными силами . . . . .</b>	<b>194</b>
§ 1. Постановка задачи и метод решения . . . . .	194
§ 2. Существование ионной конденсации. Устойчивость по отношению к объемным вариациям плотности . . . . .	198
§ 3. Определение свойств шарового плазмоида во внутренней области . . . . .	203
§ 4. Определение состояния плазмоида во внешней области, в окрестности границы . . . . .	208
§ 5. Устойчивость конфигурации по отношению к изменению формы ее поверхности . . . . .	215

Глава X. Статистическая теория «самосборки» анизотропных структур из изотропной среды . . . . .	221
§ 1. Постановка задачи и метод решения . . . . .	221
§ 2. Теоремы о «самосборке» . . . . .	226
Глава XI. Ковариантные статистические уравнения и температурные распределения в пространстве опорных элементов восьми измерений . . . . .	238
§ 1. Пространство опорных элементов . . . . .	238
§ 2. Ковариантные статистические уравнения и восьмая степень свободы у частиц . . . . .	245
§ 3. Наличие верхней границы температур . . . . .	249
§ 4. Распределение частиц по энергиям в космических лучах при достижении верхней границы температур . . . . .	254
§ 5. Численная оценка верхней границы температур . . . . .	255
Литература . . . . .	260