

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 26

Вып. 5



МАЙ 1954 г.

ИЗДАТЕЛЬСТВО АКАДЕМИИ НАУК СССР
МОСКВА

Владимир Константинович Аркадьев	(Некролог)	513
Л. Яноши. Исследования по теории каскадов. II		518
Л. И. Дорман, А. И. Кузьмин, Г. В. Тянутова, Е. Л. Фейнберг и Ю. Г. Шафер. Вариации интенсивности космических лучей и роль метеорологических факторов		537
С. В. Тябликов. Об энергетическом спектре электрона в полярном кристалле. II.		545
И. М. Лифшиц. Об определении энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости		551
Н. В. Мицкевич. Некоторые вопросы теории теплопроводности анизотропных твердых тел		557
Г. М. Авакьянц. К теории уравнений переноса в сильных электрических полях. I		562
Ю. К. Хохлов. Запись взаимодействия системы частиц с электромагнитным полем		576
Г. А. Остроумов. Электростатическая конвекция в электролитах		585
М. А. Ковнер. Колебательные спектры ароматических соединений. I. Расчет и интерпретация колебательных спектров бензола и дейтеробензолов (плоские колебания)		598
П. П. Феофилов. Анизотропия излучения центров окрашивания в кристаллах кубической сингонии		609
М. Д. Галанин и З. А. Чижикова. Выход фотолюминесценции некоторых органических кристаллов		624
С. В. Лебедев и С. Э. Хайкин. Некоторые аномалии в поведении металлов, нагреваемых импульсами тока большой плотности		629
М. С. Чмутин. Зависимость диэлектрической проницаемости кристалла NaCl от температуры		640

Письма в редакцию

А. Я. Темкин. Превращение двух фотонов в π^0 -мезон и образование π^0 -мезонов при комптон-эффекте	645
Х. И. Мамедов. К вопросу о люминесцирующих компонентах нефти	647

Главный редактор **Н. Н. АНДРЕЕВ**

Зам. главного редактора **М. М. СУЩИНСКИЙ**

Редколлегия

**Н. А. КАПЦОВ, В. П. ПЕШКОВ, Д. В. СКОБЕЛЬЦЫН,
Н. Н. СОБОЛЕВ, М. М. СУЩИНСКИЙ, И. Е. ТАММ,
Я. П. ТЕРЛЕЦКИЙ, Е. Л. ФЕЙНБЕРГ**

Подписано к печати 19.V. 1954 г. Т-04011 Формат бум. 70×108¹/₁₆. Бум. л. 4¹/₄
Печ. лист. 11,64+1 вклейка. Уч.-изд. л. 12,3 Тираж 3075 экз. Зак. 240

2-я типография Издательства Академии наук СССР. Москва, Шубинский пер., 10



ВЛАДИМИР КОНСТАНТИНОВИЧ АРКАДЬЕВ

ВЛАДИМИР КОНСТАНТИНОВИЧ АРКАДЬЕВ

После длительной болезни 1 декабря 1953 г. скончался старейший советский магнитолог, член-корреспондент Академии наук СССР, заведующий кафедрой физических основ электротехники Московского государственного университета профессор Владимир Константинович Аркадьев.

В. К. Аркадьев родился в Москве 9 (21) апреля 1884 г. Среднее образование он получил в московской 2-й гимназии, и, еще будучи учеником, решил посвятить свою жизнь научной работе в области физики. С этой целью он устроил дома небольшую физическую лабораторию, в которой занимался экспериментальной работой, а также демонстрировал сверстникам различные опыты на собственноручно изготовленных приборах.

В Московский университет В. К. Аркадьев поступил в 1904 г. и учился в нем в те годы, когда в состав профессоров-физиков входили выдающиеся ученые — Н. А. Умов и П. Н. Лебедев. Желание применить свои силы в области научных исследований привело Владимира Константиновича в 1907 г. в лабораторию П. Н. Лебедева, где широко изучались электромагнитные волны, их дисперсия и абсорбция. В связи с этим возникли первые его работы, посвященные изучению магнитных свойств ферромагнетиков в полях высокой частоты.

Исследования В. К. Аркадьева, проведенные, начиная с 1908 г., с искровыми генераторами, впервые показали сильное уменьшение магнитной проницаемости железа и никеля в интервале сантиметровых волн, а также обнаружили избирательное поглощение электромагнитных волн в этом участке спектра. Максимумы поглощения были обнаружены у железа при частотах, соответствующих волнам от 2 до 7 см, а у никеля — 3 см. Таким образом впервые было открыто явление ферромагнитного резонанса, которое за последние годы привлекло к себе внимание многих исследователей в связи с появлением ламповых генераторов сантиметровых волн. Изучая поглощение электромагнитных волн в параллельных проволоках, В. К. Аркадьев обнаружил, что магнитная проницаемость железа падает от значения $\mu = 93$ при длине волны $\lambda = 72,7$ см до $\mu = 8$ при $\lambda = 1,31$ см. Значения магнитной проницаемости никеля при этих же длинах волн оказались соответственно равными 20 и 1.

Факт уменьшения магнитной проницаемости при укорочении длины электромагнитных волн был подтвержден Владимиром Константиновичем другим методом — при изучении отражения этих волн от зеркал, состоявших из параллельных никелевых или железных проволок. Результаты исследований, опубликованные в 1912—1913 гг., показывали, что значения магнитной проницаемости железа и никеля, определяемые двумя упомянутыми способами, не совпадают друг с другом. Для объяснения этих явлений В. К. Аркадьев дал первую теорию магнитного резонанса и магнитной дисперсии. Введя при построении свсей теории понятие комплексной магнитной проницаемости, он показал, что кажущаяся проницаемость μ_n , определенная по коэффициенту отражения, должна быть отлична от кажущейся проницаемости μ_k , определяемой по коэффици-

енту поглощения. Таким образом, была разъяснена причина несовпадения упомянутых выше экспериментальных результатов.

Строя свою теорию, Владимир Константинович пользовался гипотезой о существовании внутри ферромагнетика молекулярных магнитов, к раскрытию свойств которых были обращены его научные исследования в последующие годы. Однако течение работ его в этом направлении было вскоре нарушено войной 1914—1917 гг., когда немецкие империалисты, нарушив международные соглашения, впервые использовали в качестве оружия отравляющие газы. Русские ученые-патриоты (Н. Д. Зелинский, В. К. Аркадьев и др.) стали изыскивать способы защиты от боевых отравляющих веществ. С 1915 г. деятельность В. К. Аркадьева имела своим предметом противохимическую оборону. Организованная им при Комитете Всероссийского земского и городского союзов «Земгор» физико-химическая лаборатория была первой в России лабораторией противохимической обороны. Она выполнила в 1916—1918 гг. большую и важную оборонную работу и выпустила первое русское руководство по научным основам борьбы с ядовитыми газами. В. К. Аркадьевым в эти годы были изобретены приборы для предупреждения о газовых атаках, анемометр и т. п. В отличие от других приборов того же рода, анемометр В. К. Аркадьева был рассчитан на малые скорости ветра, при которых только и могут производиться газовые атаки. Основным рабочим элементом его был парафинированный листок картона в 4 г весом, свободно висевший на рамке анемометра и отклонявшийся более или менее сильно от вертикали, в зависимости от силы ветра. Простой по конструкции анемометр В. К. Аркадьева позволял производить наблюдения и в ночное время, что было существенно важно в боевой обстановке.

Как только окончилась война 1914—1917 гг. В. К. Аркадьев вернулся к исследованиям в области электромагнетизма. В статье, опубликованной в марте 1920 г. и занявшей полностью весь седьмой номер журнала «Телеграфия и телефония без проводов», им разбирались ряд теоретических и практических вопросов: устанавливалось, что магнитная проницаемость сердечников с разомкнутой магнитной цепью может, почти не завися от силы поля и сорта железа, зависеть только от формы сердечника; рассматривался вопрос об образовании вихревых токов в железе и о явлении магнитной вязкости, которая влияет на намагничение железа; указывалась скорость этого процесса, измеренная одним из первых сотрудников В. К. Аркадьева — Б. А. Введенским. Конец работы, посвященный намагничиванию железа в полях высокой частоты, содержал попытку вычислить размеры элементарных магнитов и их собственные периоды.

В 1918 г. В. К. Аркадьев вошел в состав профессоров Московского университета, где около него собралась группа молодых физиков, интересовавшихся электромагнитными волнами и проблемами ферромагнетизма. Так возникла Московская магнитная лаборатория, ставшая крупной школой советских физиков. В 1931 г. эта лаборатория получила более отвечающее ее тематике наименование: Лаборатория электромагнетизма.

Начиная с 1918 г., В. К. Аркадьевым разрабатывалась электромагнитная теория пассивных спектров. Она оказалась применимой к обширной группе сред — от газов до горных пород и металлов (в частности, магнитных). В магнитной лаборатории изучалось распространение и поглощение коротких электромагнитных волн, явления отражения и т. п. Экспериментальные работы сотрудников и учеников Владимира Константиновича в это время опирались на его теорию, которая обобщала ряд явлений дисперсии и абсорбции.

При построении своей теории В. К. Аркадьев исходил, во-первых, из того, что в не слишком сильных полях электростатическая индукция D и магнитная B пропорциональны соответствующим напряженностям полей E и H , т. е. $D = \epsilon E$ и $B = \mu H$.

Второе основное положение его теории состоит в том, что в переменных полях фазы индукции ($\mathbf{D}$ или $\mathbf{B}$) отстают от фаз напряженности ($\mathbf{E}$ или $\mathbf{H}$), чем обусловлен как электрический, так и магнитный гистерезис. Эти экспериментальные факты позволили В. К. Аркадьеву в 1913 г. вывести взамен несимметричных уравнений электромагнитного поля (в форме Максвелла) два симметричных уравнения:

$$-\frac{\varepsilon}{c} \frac{d\mathbf{E}}{dt} + \frac{4\pi\sigma}{c} \mathbf{E} = \text{rot } \mathbf{H}$$

$$\frac{\mu}{c} \frac{d\mathbf{H}}{dt} + \frac{4\pi\rho}{c} \mathbf{H} = -\text{rot } \mathbf{E}$$

(уравнения Аркадьева). Они относятся к бикомплексной среде, электрические свойства которой характеризуют диэлектрическая проницаемость ε и удельная проводимость σ , магнитными же характеристиками являются магнитная проницаемость μ и магнитная проводимость ρ . На основе этих уравнений оказалось возможным планомерно изучать зависимость магнитных характеристик ферромагнетиков от частоты воздействующего на них электромагнитного поля.

Теория магнитной дисперсии и абсорбции В. К. Аркадьева оказалась приложимой к ферромагнитным материалам, применяемым в электротехнике и технике связи. На основе этой теории возникла прикладная магнитная спектроскопия, которая приобрела за последние годы существенное практическое значение в промышленности и металлургии. Изученные В. К. Аркадьевым и его сотрудниками процессы периодического намагничивания ферромагнетиков используются в электротехнике в связи с проблемой замены медных проводов железными.

В его же лаборатории велось исследование явлений магнитной вязкости и влияния вихревых токов на процессы перемагничивания. Вместе с тем в Лаборатории электромагнетизма были выполнены проблемные работы для развития основных положений электромагнитной теории света, утверждающие тождество природы световых и кратчайших радиоволн. Здесь был изобретен А. А. Глаголевой-Аркадьевой новый источник электромагнитных волн — массовый излучатель (1922 г.), при помощи которого было заполнено «белое пятно» на шкале электромагнитных волн между инфракрасными и кратчайшими из известных тогда радиоволнами.

В связи с изучением отражения весьма коротких электромагнитных волн от металлов стоит открытый В. К. Аркадьевым принцип использования времени реверберации коротких электромагнитных волн в замкнутой металлической полости для оценки отражательной способности ее стенок — время реверберации электромагнитных волн в этих условиях тем меньше, чем больше магнитная проницаемость отражающей поверхности стенок. Предложенный Владимиром Константиновичем принцип используется ныне как для измерения отражательной способности металлов, так и для измерения поглощательной способности газа, помещенного в металлической полости. Этот метод, получивший за границей название эхо-бокса, стал применяться в Америке только через 30 лет после его открытия в России.

В 1934 г. В. К. Аркадьев впервые осуществил стиктографический способ обнаружения сантиметровых волн, подобный фотографированию («стиктос» — испещренный точками). В результате совершенствования этого метода в 1939—1940 гг. В. К. Аркадьевым были изобретены экраны, могущие обнаруживать электромагнитные волны сантиметрового диапазона и напоминающие экраны для рентгеновых или ультрафиолетовых лучей. Таким образом, открылась новая возможность просвечивания изоляторов и полупроводников способом, отличным от рентгеновского просвечивания. Значение стиктографии, которую в Америке оценили только

в 1947 г., наиболее ярко выступает там, где рентгеновский метод оказывается неприменимым. Таковы, например, случаи просвечивания диэлектриков или полупроводников с вкраплениями воды и т. п.

Занимаясь крупными проблемными работами, основные направления которых упомянуты выше, В. К. Аркадьев всегда любил осуществлять новые оригинальные физические эксперименты. Так, например, под его руководством в 1912 г. были выполнены важные опыты по дифракции света; фотографии исследованных в этих опытах случаев дифракции до сих пор встречаются в учебниках физики. По его идее был построен в 1914 г. первый в мире «генератор молний», первоначально описанный под названием «искрового конденсаторного трансформатора». Он состоит из батареи параллельно соединенных конденсаторов, заряжаемых от типового трансформатора 50-периодного тока, которые разряжаются, будучи соединенными последовательно.

Принципиальной особенностью этого устройства было его автоматическое переключение при помощи ряда искровых промежутков, соединяющих разноименные обкладки смежных конденсаторов. При пробивании искрового промежутка (самого короткого) между разноименными обкладками первого и второго конденсатора повышался потенциал последнего, что вызывало проскакивание более длинной искры между разноименными обкладками второго и третьего конденсатора и т. д. Ряд последовательных искр, доходя до последнего конденсатора, разряжал всю батарею, оказывающуюся теперь соединенной последовательно. В первом устройстве такого рода из 9 конденсаторов с емкостью по 800 см каждый длина искры, даваемой батареей, достигала 15 см, в то время как разрядный потенциал каждого отдельного конденсатора соответствовал длине искры менее 1 см. В иностранной литературе устройство подобного рода получило совершенно необоснованное название генератора Маркса, который описал эту схему в 1928 г. В 1945 г. В. К. Аркадьев предложил и впервые осуществил эффектный опыт парения магнита над сверхпроводящим свинцовым диском, охлаждаемым жидким гелием, а также осуществил другие своеобразные эксперименты.

Оригинальность и ценность работ В. К. Аркадьева следует особо подчеркнуть в связи с появлением в иностранной научной литературе ряда статей плагиаторского характера. Авторы одних из них выдавали, например, в 1938 г. за достижения зарубежной науки якобы открытое за границей падение магнитной проницаемости ферромагнетиков в области сантиметровых волн, которое было описано В. К. Аркадьевым еще в 1912 г. Другие пытались присвоить себе честь создания теории электромагнитного поля в ферромагнетиках, введение понятия комплексной магнитной проницаемости и т. д. вплоть до приписывания себе самых уравнений Аркадьева.

Два направления деятельности были основными в жизни В. К. Аркадьева — собственная научная работа и подготовка молодых физиков-исследователей. Поэтому и вся его жизнь почти целиком прошла в стенах Московского университета и Академии наук СССР. Избранный членом-корреспондентом Академии наук СССР Владимир Константинович вел активную работу в Техническом отделении ее в направлении изучения проблем электротехнического металла, магнитного анализа, магнитной и ультразвуковой дефектоскопии и др.

Будучи большим патриотом, В. К. Аркадьев уделял весьма много внимания и энергии делу подготовки научных кадров. «Магнитный коллоквиум», начавший функционировать в университете с апреля 1921 г., был местом общения и дискуссий его сотрудников и учеников. В дальнейшем в 1923 г. им была организована при Московском государственном университете специальность «электрические измерения» с соответствующей лабораторией для подготовки работников исследовательских институтов, а в 1939 г. он же создал в составе физического факультета Московского

университета кафедру теоретических основ электротехники на базе Лаборатории электромагнетизма.

Под личным научным руководством В. К. Аркадьева было подготовлено свыше 100 квалифицированных физиков, многие плодотворно работающих в академиях наук Советского Союза, Белоруссии, Латвии, в высших учебных заведениях и исследовательских институтах. Под его же руководством и по его тематике велось, начиная с 1935 г., заочное повышение квалификации и диссертационные работы преподавателей высших учебных заведений ряда городов (Воронеж, Ярославль, Горький и др.).

Громадная научная эрудиция В. К. Аркадьева, особенно в области классической теории электромагнитных явлений, большой опыт экспериментатора, а также исключительно прямой и открытый характер привлекали к нему молодежь, имевшую стремление к занятиям физикой. Со своей стороны Владимир Константинович, как руководитель научной школы, с исключительным вниманием и доброжелательностью относился к своим ученикам, направляя их исследования и искренне радуясь всякому их успеху.

Сосредоточив свои интересы на научных исследованиях, Владимир Константинович не терпел недобросовестности ни в научных, ни в житейских делах, был далек от честолюбия, прост в своем образе жизни и в обращении с другими.

Выдающиеся личные качества В. К. Аркадьева надолго останутся в памяти всех близко его знавших. Ученики же и сотрудники его не раз с теплым чувством сердечной благодарности вспомнят своего руководителя — выдающегося ученого и глубоко принципиального, справедливого человека.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ТЕОРИИ КАСКАДОВ. II

Л. Яноши

Показано, что многие известные достижения теории каскадов (среди них также результаты, связанные с поперечным распределением атмосферных ливней) могут быть просто выведены из обобщенных G -уравнений, полученных в [1].

1. В предыдущем сообщении [1] мы дали общие методы определения производящих функций, описывающих каскад. G -уравнения (26) или (32) работы [1] однозначно определяют G -функцию, при условии, что известны функция φ , соответствующая отсутствию столкновений, и поперечные сечения столкновений. Действительно, G -уравнения определяют значения функции для $x=0$, а также позволяют, по крайней мере в принципе, определить G -функцию для всех других значений x как результат ступенчатого интегрирования. Хотя ступенчатое интегрирование в принципе возможно, оно практически не выполнимо в этой общей форме из-за большого числа переменных в G , а также вследствие того, что G -уравнения имеют такую форму, при которой интегрирование может быть выполнено только одновременно для всех значений всех переменных. Большой объем вычислительной работы, связанной с такой процедурой, делает ее применение затруднительным.

Несмотря на эту трудность, G -уравнения имеют большое практическое применение. Из G -уравнений мы можем выводить уравнения для различных моментов распределения, вычисление же таких моментов ни в коем случае не является излишним.

Уравнения для таких моментов, которые выведены из G -уравнений, в большинстве своем эквивалентны уравнениям, выведенным различными авторами в частных случаях при помощи специального рассмотрения. Наш метод имеет то преимущество, что он дает общую схему, включающую большую часть результатов, полученных ранее, и выводит их, исходя из единой точки зрения.

Распределение в случае отсутствия столкновений

2. Ниже приводятся явные выражения для $\varphi(\mathfrak{F}; \mathfrak{F}'; x)$, т. е. для вероятности того, что первичная частица $\mathfrak{F}$ вдоль пути x не претерпевает ни одного столкновения с резким изменением энергии и рассеивается так, что на глубине x она находится вблизи $\mathfrak{F}'$.

Кинетическое уравнение может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x)}{\partial x} = & - (\alpha(\mathfrak{F}) + \int_{\mathfrak{F}''} w(\mathfrak{F}', \mathfrak{F}'') d\mathfrak{F}'') \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) + \\ & + \int_{\mathfrak{F}''} w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') \varphi(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}'; x) d\mathfrak{F}'', \end{aligned} \quad (1)$$

где $w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}') dx$ есть вероятность столкновения, при котором не происходит резкого изменения $\mathfrak{F} \rightarrow \mathfrak{F}'$ вдоль dx . Мы полагаем, что это

изменение имеет заметную вероятность лишь при условии, если оно невелико. Мы можем записать уравнение (1) в другой форме, а именно:

$$\frac{\partial \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x)}{\partial x} = -\alpha(\mathfrak{F}) \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) + \\ + \int_{\mathfrak{F}''} \{w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') \varphi(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}; x) - w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x)\} d\mathfrak{F}''. \quad (2)$$

Так как w имеет значение только для $\mathfrak{F}'' \sim \mathfrak{F}$, мы можем разложить φ по степеням $\mathfrak{F}'' - \mathfrak{F}$ и получить таким образом для интеграла выражение

$$\int_{\mathfrak{F}''} = \frac{\partial \varphi}{\partial F} \int (F'' - F) w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') d\mathfrak{F}'' + \frac{\partial \varphi}{\partial Z} \int (Z'' - Z) w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') d\mathfrak{F}'' + \\ + \frac{\partial \varphi}{\partial A} \int (A'' - A) w(\mathfrak{F}; \mathfrak{F}'') d\mathfrak{F}'' + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial A^2} \int (A - A'')^2 w(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'') d\mathfrak{F}'' +$$

+ члены более высокого порядка.

Если мы возьмем w симметричным по отношению к A' и A'' , то множитель $\partial \varphi / \partial A$ будет равен нулю; таким образом зависимость φ от A дается вторым моментом. Другие интегралы можно получить, исходя из их физического смысла. Множитель $\partial \varphi / \partial F$ дает величину непрерывной потери энергии и следовательно равняется $-O(F)$ [если пренебречь тем, что $-O(F)$ есть величина потери энергии в направлении движения частицы, и поэтому потеря на пути dx есть $-O(F) dx / \cos \vartheta$, а не просто $-O(F) dx$]. Множитель $\partial \varphi / \partial Z$ есть просто A , поскольку среднее смещение ∂Z вдоль ∂x , если первоначальное направление было A , есть $A dx$. Множитель $\partial \varphi / \partial A$ равен нулю на основании симметрии (мы рассматриваем только небольшие углы, где $\vartheta \sim \operatorname{tg} \vartheta = A$). Наконец, множитель $\partial^2 \varphi / \partial A^2$ есть величина среднего квадратичного углового рассеяния; она является функцией энергии и известна из теории рассеяния. Таким образом мы имеем для нашего уравнения

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\alpha(F) + A \frac{\partial \varphi}{\partial Z} - O(F) \frac{\partial \varphi}{\partial F} + \frac{1}{2} \sigma^2(F) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial A^2}. \quad (3)$$

Мы написали во всех поперечных сечениях F вместо $\mathfrak{F}$, что соответствует пренебрежению множителем $1 / \cos \vartheta$; таким образом использование F связано опять с предположением только малых углов рассеяния.

3. Приступим к решению уравнения (3). В последнем уравнении можно отделить члены, обусловленные столкновением с резким изменением энергии, а также те, которые выражают непрерывную потерю энергии. Итак напомним

$$\varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) = \varphi_0(F, x) \psi(A, Z; A', Z'; x) \delta(F(x) - F'),$$

где $\varphi(F, x)$ — функция, данная в уравнении (8) [1], δ -функция соответствует непрерывному изменению энергии (мы пренебрегли разбросом потерь энергии вследствие пренебрежения членами, содержащими производные более высокого порядка по F). Для ψ находим

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -A \frac{\partial \psi}{\partial Z} + \frac{1}{2} \sigma^2(x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial A^2}, \quad (4)$$

где мы написали $\sigma(x)$ вместо $\sigma(F(x))$.

Нормированное решение (4), соответствующее первоначальному направлению A и первоначальному смещению Z , получается в виде

$$\psi(A, Z; A', Z'; x) = \psi_0(A'', Z'', x), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} A'' &= A' - A, \\ Z'' &= Z' - Z - xA; \end{aligned} \quad (6)$$

A'' — изменение направления частицы и Z'' — смещение частицы по отношению к ее первоначальной касательной; обе величины не зависят от системы координат. Явное выражение для ψ_0 будет

$$\begin{aligned} \psi_0(A'', Z'', x) &= \frac{1}{4\pi V\Delta} \exp \left\{ -\frac{\alpha_1 A''^2 - 2\alpha_2 A'' Z'' + \alpha_3 Z''^2}{4\Delta} \right\}; \\ \Delta &= \alpha_1 \alpha_3 - \alpha_2^2, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\alpha_k = \frac{1}{2} \int_0^x (x - x')^{3-k} \sigma^2(x') dx', \quad k = 1, 2, 3.$$

В частности, для $\sigma^2(x) = \text{const} = \sigma^2$ имеем

$$\alpha_1 = \frac{\sigma^2}{6} x^3, \quad \alpha_2 = \frac{\sigma^2}{4} x^2, \quad \alpha_3 = \frac{\sigma^2}{2} x, \quad \Delta = \frac{\sigma^2}{48} x^4. \quad (8)$$

Таким образом

$$\psi_0(A'', Z'', x) = \frac{V\sqrt{3}}{\pi\sigma^2 x^2} \exp \left\{ -\frac{2}{\sigma^2} \left(\frac{A''^2}{x} - \frac{3A'' Z''}{x^2} + \frac{3Z''^2}{x^3} \right) \right\}. \quad (9)$$

(9) было дано Ферми (см. [2]).

Для дальнейших применений напомним преобразование Лапласа функции ψ_0 по отношению к A'' и Z'' , а именно:

$$\begin{aligned} L_{\mu\nu} \{ \psi_0(x) \} &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mu A'' - \nu Z'') \psi_0(A'', Z'', x) dA'' dZ'' = \\ &= \exp \{ \alpha_3 \mu^2 + 2\alpha_2 \mu \nu + \alpha_1 \nu^2 \}. \end{aligned} \quad (10)$$

Суммируя, мы находим, что в приближении, ограничиваемом малыми углами, функция, соответствующая случаю отсутствия столкновений, может быть записана в виде

$$\varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) = \varphi(F, x) \delta(F(x) - F') \psi_0(A' - A, Z' - Z - Ax, x). \quad (11)$$

Явное выражение для $\varphi(F, x)$ дается соотношением (8) [1], а для ψ — соотношением (7).

4. Далее мы увидим, что при помощи G -уравнений можно определить преобразования Лапласа G -функции (или ее производных) по отношению к перемещению первичной частицы. С физической точки зрения представляет интерес не столько преобразование по отношению к параметрам первичной частицы, сколько преобразование по отношению к параметрам вторичных частиц. К счастью, существует простая связь между ними, и мы выведем теперь эту связь.

Обозначим [см. ниже уравнение (14)]

$$\mathfrak{S}_1(A, Z; A', Z'; x) dA' dZ'$$

— среднее число частиц (произвольно определенных по отношению к энергии и типу) на глубине x , образующихся от первичной частицы

с начальным направлением A и начальным смещением Z . Для достаточно малых значений A , Z и A' , Z' можно ожидать с хорошим приближением, что среднее $\mathfrak{S}_1$ должно зависеть только от величин A'' и Z'' , данных в (6). Таким образом мы можем написать

$$\mathfrak{S}_1(A, Z; A', Z'; x) = \mathfrak{S}_0(A'', Z'', x). \quad (12)$$

Обозначим преобразование Лапласа от величины $\mathfrak{S}_0$ посредством

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mu A'' - \nu Z'') \mathfrak{S}_0(A'', Z'', x) dA'' dZ'' = L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_0(x)\}.$$

Точно так же обозначим преобразование Лапласа от величины $\mathfrak{S}_1$ по отношению к A , Z или по отношению к A' , Z' посредством

$$L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(A', Z', x)\} \text{ и } L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(A, Z, x)\}.$$

Переменные, которые остаются после преобразования, показаны в скобках. Выводя эти преобразования Лапласа, будем помнить, что

$$L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_0(x)\} = L_{-\mu, -\nu} \{\mathfrak{S}_0(x)\}.$$

Находим

$$\begin{aligned} L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}(A, Z, x)\} &= \exp(-(\mu + \nu x)A - \nu Z) L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_0(x)\}, \\ L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}(A', Z', x)\} &= \exp(-(\mu - \nu x)A' - \nu Z') L_{\mu-\nu x, \nu} \{\mathfrak{S}_0(x)\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Тогда имеем

$$L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(A, Z, x)\}_{A=Z=0} = L_{\mu+\nu x, \nu} \{\mathfrak{S}_1(A', Z', x)\}_{A'=Z'=0}.$$

Левая часть выражения представляет производящую функцию моментов распределения вторичных частиц, в то время как правая часть выражения представляет функцию, которая получается из лапласова преобразования G -уравнения.

Моменты, представляющие интерес в физическом отношении, получаются, таким образом, из моментов, которые можно легко получить из G -уравнения следующим путем:

$$\begin{aligned} \langle A'^h \rangle &= (-1)^h \frac{\partial^h}{\partial \mu^h} L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(A, Z, x)\}_{A=Z=0, \mu=\nu=0} = \\ &= (-1)^h \frac{\partial^h}{\partial \mu^h} L_{\mu+\nu x, \nu} \{\mathfrak{S}_1(A' = 0, Z' = 0, x)\}_{\mu=\nu=0} = \langle A^h \rangle, \end{aligned}$$

в то время как для моментов Z и Z'

$$\begin{aligned} \langle Z'^h \rangle &= \frac{\partial^h}{\partial \nu^h} L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(A, Z, x)\}_{A=Z=0, \mu=\nu=0} = \\ &= \frac{\partial^h}{\partial \nu^h} L_{\mu+\nu x, \nu} \{\mathfrak{S}_1(A' = 0, Z' = 0, x)\}_{\mu=\nu=0} = \sum_{l=0}^h \binom{h}{l} \langle A^l Z^{h-l} \rangle x^l. \end{aligned}$$

Аналогично

$$\langle A'^h Z'^m \rangle = \sum_{l=0}^h \binom{m}{l} \langle A^{h+l} Z^{m-l} \rangle x^l.$$

Мы видим, что моменты по отношению к вторичным частицам могут выводиться из моментов по отношению к первичной

частице. В частности, получаем, например, для среднего квадратичного отклонения

$$\langle Z'^2 \rangle = \langle Z^2 \rangle + 2x \langle AZ \rangle + x^2 \langle A^2 \rangle.$$

Аналогичным образом получаем для соотношения между A' и Z'

$$\langle A'Z' \rangle = 2x \langle AZ \rangle + x \langle A^2 \rangle;$$

аналогичные выражения имеют место для моментов более высокого порядка.

На первый взгляд может показаться удивительным, что действительное отклонение $\langle Z'^2 \rangle$ больше, чем $\langle Z^2 \rangle$ — «отклонение первичной частицы». Это, однако, тесно связано со следующим обстоятельством. Рассмотрим частицу, которая рассеялась на угол a и смещена на величину z от своей начальной касательной. Для такой частицы имеем (в приближении малых углов)

$$A - A' = a, \quad Z + Ax - Z' = z.$$

Мы можем сместить траекторию частицы как целое в пространстве и, в частности, можно ориентировать ее следующим специальным образом.

1. Направим начальную касательную по оси x ; тогда имеем

$$A = Z = 0; \quad A' = -a, \quad Z' = -z.$$

2. Мы можем направить конечную касательную траектории по оси x ; тогда получим

$$A = a, \quad Z = z - ax; \quad A' = 0, \quad Z' = 0.$$

Вероятность того, что частица, возникающая на некоторой траектории, проследует вдоль нее по всей ее длине, зависит только от формы, но не зависит от ориентации этой траектории.

Для первого случая таким образом имеем

$$\langle A'^2 \rangle = \langle a^2 \rangle, \quad \langle Z'^2 \rangle = \langle z^2 \rangle,$$

в то время как для второго случая находим

$$\begin{aligned} \langle A^2 \rangle &= \langle a^2 \rangle = \langle A'^2 \rangle, \\ \langle Z^2 \rangle &= \langle (z - ax)^2 \rangle = \langle z^2 \rangle - 2x \langle az \rangle + x^2 \langle a^2 \rangle = \\ &= \langle Z'^2 \rangle - 2x \langle A'Z' \rangle + x^2 \langle A'^2 \rangle \leq \langle Z'^2 \rangle. \end{aligned}$$

Вышеприведенное уравнение эквивалентно уравнению (13), за исключением того, что мы вывели его здесь только для рассеяния единичной частицы.

Первые моменты по отношению к u

5. Дифференцируя G -функцию по u , мы можем получить различные моменты распределения. В частности, имеем

$$\left(\frac{\partial}{\partial u_i} G(\mathfrak{F}, S^h; x; u) \right)_{u=1} = \mathfrak{S}_1(\mathfrak{F}; S_l, x) \quad (14)$$

— выражение, представляющее среднее число частиц на глубине x в интервале S_l . Для упрощения отбросим переменную S_l , где она не является существенной, и напомним просто $\mathfrak{S}_1(\mathfrak{F}; x)$.

Кинетическое уравнение, определяющее $\mathcal{S}_1(\mathfrak{F}; x)$, можно получить из (32) [1] дифференцированием; получаем таким образом

$$\mathcal{S}_1(\mathfrak{F}; x) = a(\mathfrak{F}; x) + \int_0^x \int_{\mathfrak{F}'} b(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; \xi) \mathcal{S}_1(\mathfrak{F}'; x - \xi) d\xi d\mathfrak{F}', \quad (15)$$

где

$$a(\mathfrak{F}; x) = \int_{\mathfrak{F}'} \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) \Delta(\mathfrak{F}'; S_l) d\mathfrak{F}' \quad (16)$$

и

$$b(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; x) = \int_{\mathfrak{F}''} \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}''; x) W^{(1)}(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}') d\mathfrak{F}'', \quad (17)$$

где

$$W^{(1)}(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}') = W_1(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}') + \sum_{\nu > 1} \int_{\mathfrak{F}''^{\nu-1}} W_\nu(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}', \mathfrak{F}''^{\nu-1}) d\mathfrak{F}''^{\nu-1}. \quad (18)$$

$W^{(1)}$ — плотность вероятности для столкновения, где появляется, по меньшей мере, одна вторичная частица (возможно, первичная) вблизи $\mathfrak{F}'$.

Уравнение (15) дает зависимость изменения среднего числа частиц в произвольно выбранном интервале S_l как функцию x . Коэффициенты a и b могут быть найдены из вероятностей столкновения и из функций φ , соответствующих случаю без столкновений.

6. Чтобы вывести формулы, которые могут быть использованы для численных вычислений, мы должны отделить зависимость $\mathcal{S}_1$ от компонент E, t, A, Z и от величины $\mathfrak{F}$. В функциях, соответствующих случаю отсутствия столкновений, представленных в (11), зависимость от A и Z уже отделена от зависимости от E (оба множителя зависят явно от x и t).

Поперечное сечение столкновения $W^{(1)}(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}')$ зависит, кроме F и F' , от разности $A - A'$. Далее, поскольку никакого внезапного изменения Z не может возникнуть в результате столкновения с резким изменением энергии, мы можем написать вообще для поперечного сечения

$$W^{(1)}(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}') = W^{(1)}(F, F', A - A') \delta(Z - Z'). \quad (19)$$

Преобразование Лапласа функции $W^{(1)}$ по отношению к параметрам A и Z первичной частицы может быть написано

$$L_{\mu\nu} \{ W^{(1)}(F; \mathfrak{F}') \} = L_\mu \{ W^{(1)}(F, F') \} \exp(-\mu A' - \nu Z'), \quad (20)$$

где мы написали

$$L_{\mu\nu} \{ W^{(1)}(F, F') \} = \int_{-\infty}^{+\infty} W^{(1)}(F, F', A'') \exp(-\mu A'' - \nu Z'') dA''. \quad (21)$$

В частности, мы можем использовать обозначение

$$L_0 \{ W^{(1)}(F, F') \} = W^{(1)}(F, F'). \quad (22)$$

Последнее является поперечным сечением столкновения, усредненным по всем углам излучения.

7. Итак, чтобы отделить зависимость от переменных A и Z , возьмем преобразование Лапласа выражения (15) по отношению к A и Z .

Таким образом, меняя соответствующим образом порядок интегрирования, рассмотрим следующее уравнение:

$$L_{\mu\nu} \{ \mathfrak{S}_1(F, x) \} = L_{\mu\nu} \{ a(F, x) \} + \\ + \int_0^x d\xi \int_{\mathfrak{F}''} L_{\mu\nu} \{ b(F; \mathfrak{F}'; \xi) \} \mathfrak{S}_1(\mathfrak{F}'; x - \xi) d\mathfrak{F}', \quad (23)$$

где мы использовали для преобразования Лапласа, как и ранее, обозначение

$$L_{\mu\nu} \{ \mathfrak{S}_1(F, x) \} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mu A - \nu Z) \mathfrak{S}_1(\mathfrak{F}; x) dA dZ \quad (24)$$

и аналогичное обозначение для других функций. Существенным в этом обозначении является то, что мы пишем после L параметры преобразования всех преобразуемых переменных и выписываем в скобках все переменные, которые не были преобразованы. Существенной особенностью является то, что мы берем преобразования Лапласа по отношению к параметрам первичных частиц и сохраняем S_l фиксированной. Этот прием ведет к математически более простым выражениям, чем преобразования по отношению к конечным значениям.

Преобразование Лапласа от a может быть вычислено следующим образом: применяя преобразование к обеим сторонам (16), при помощи (11) и (13) имеем

$$L_{\mu\nu} \{ a(\mathfrak{F}; x) \} = \\ = \varphi(F, x) \int_{\mathfrak{F}'} \delta(F(x) - F') L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \psi_0(x) \} \exp \{ -(\mu - \nu x) A' - \nu Z' \} \Delta(\mathfrak{F}'; S_l) d\mathfrak{F}'.$$

Интегрирование по F сводится к замене F' на $F(x)$; интегрирования по A' и Z' дают преобразование Лапласа разрывной функции Δ .

Итак мы имеем

$$L_{\mu\nu} \{ a(\mathfrak{F}, x) \} = \varphi(F(x) L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \psi_0(x) \} \cdot L_{\mu-\nu, \nu} \{ \Delta(F(x), S_l) \}.$$

Примем теперь, что интервал S_l является очень узким по отношению к переменным A' и Z' . Таким образом мы ограничиваем интервал S_l так, чтобы он содержал только значения $|A'| \leq \frac{1}{2} \Delta A$ и $|Z'| \leq \frac{1}{2} \Delta Z$, т. е. направлениями, почти параллельными оси x , и частицами, движущимися почти вдоль оси x . Тогда находим при условии пренебрежения членами высшего порядка относительно ΔA и ΔZ

$$L_{\mu\nu} \{ \Delta(F(x), S_l) \} = \Delta(F(x), S_l) \Delta A \Delta Z,$$

и полное выражение для преобразования есть

$$L_{\mu\nu} \{ a(F, x) \} = \varphi(F, x) L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \psi_0(x) \} \Delta(F(x), S_l) \Delta A \Delta Z. \quad (25)$$

Второй член (23) может быть преобразован аналогичным образом.

Применяя преобразование $L_{\mu\nu}$ к (17) по отношению к A и Z , находим при помощи (11)

$$L_{\mu\nu} \{ b(F; \mathfrak{F}'; x) \} = \int_{\mathfrak{F}''} L_{\mu\nu} \{ \varphi(F; \mathfrak{F}''; x) \} W^{(1)}(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}') d\mathfrak{F}'' = \\ = \varphi(F, x) L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \psi_0(x) \} \int_{\mathfrak{F}''} \delta(F(x) - F'') \exp \{ -(\mu - \nu x) A'' - \nu Z'' \} \times \\ \times W^{(1)}(\mathfrak{F}'', \mathfrak{F}') d\mathfrak{F}''.$$

При помощи (20) получаем далее

$$L_{\mu\nu} \{b(F'; \mathfrak{F}'; x)\} = \\ = \varphi(F, x) L_{\mu-\nu x, \nu} \{\psi_0(x)\} L_{\mu-\nu x} \{W^{(1)}(F(x), F')\} \exp \{-(\mu - \nu x) A' - \nu Z'\}.$$

Вводя последнее выражение в (23), получаем для преобразованного уравнения при помощи (25)

$$L_{\mu\nu} \{\mathfrak{S}_1(F, x)\} = \varphi(F, x) L_{\mu+\nu x, \nu} \{\psi_0(x)\} \Delta(F(x), S_l) \Delta A \Delta Z + \\ + \int_0^x d\xi \int_{F'} \varphi(F, \xi) L_{\mu+\nu\xi, \nu} \{\psi_0(\xi)\} L_{\mu+\nu\xi} \{W^{(1)}(F(\xi), F')\} \times \\ \times L_{\mu+\nu\xi, \nu} \{\mathfrak{S}_1(F', x - \xi) dF'\}. \quad (26)$$

Коэффициенты в вышеприведенном уравнении могут быть выражены через поперечные сечения столкновения, таким образом это уравнение позволяет определить преобразование Лапласа величины $\mathfrak{S}_1$ посредством ступенчатого интегрирования по x . Чтобы вывести из (26) хорошо известные формулы, разделим уравнение на $\Delta A \Delta Z$ и введем

$$\mathfrak{S}_1(\mathfrak{F}; x) / \Delta A \Delta Z = \mathfrak{s}_1(F, x).$$

Последняя функция выражает плотность частиц вблизи $A' = Z' = 0$, образующихся от первичных частиц, падающих в направлении A и со смещением Z .

Кинетическое уравнение для среднего числа частиц может быть написано, если заменить μ на $\mu - \nu x$

$$L_{\mu-\nu x, \nu} \{\mathfrak{s}_1(F, x)\} = \varphi(F, x) L_{\mu\nu} \{\psi_0(x)\} \Delta(F(x), S_l) + \\ + \int_0^x d\xi \int_{F'} \varphi(F, \xi) L_{\mu-\nu(x-\xi), \nu} \{\psi_0(\xi)\} L_{\mu-\nu(x-\xi)} \{W^{(1)}(F(\xi), F')\} \times \\ \times L_{\mu-\nu(x-\xi)} \{\mathfrak{s}_1(F', x - \xi)\} dF'. \quad (27)$$

8. Выведем из вышеприведенного уравнения несколько хорошо известных формул.

Положим $\mu = \nu = 0$ и напомним

$$L_{00} \{\mathfrak{s}_1(F, x)\} = \mathfrak{s}_1(F, x);$$

поскольку $L_{00} \{\psi_0(x)\} = 1$, находим

$$\mathfrak{s}_1(F, x) = \varphi(F, x) \Delta(F(x), S_l) + \\ + \int_0^x \varphi(F, \xi) d\xi \int_{F'} W^{(1)}(F(\xi), F') \mathfrak{s}_1(F', x - \xi) dF'. \quad (28)$$

Вышеприведенное уравнение могло быть выведено прямо из G -уравнения (26) [1]. Уравнение (28) зависит только от двух переменных F и x и может быть проинтегрировано численно.

В литературе подробно рассматриваются следующие случаи, которые содержатся в (28):

Непрерывная потеря отсутствует, т. е. $F(x) = F$.

Полное поперечное сечение столкновений не зависит от энергии. Таким образом

$$W^{(1)}(F, F') = \frac{1}{F} W^{(1)}\left(\frac{F'}{F}\right) = \frac{1}{E} W^{(1)}\left(\frac{E'}{E}, t, t'\right);$$

в последнем случае

$$\varphi(F, x) = \exp \{-\alpha(t) x\}$$

и

$$\Delta(F(x), S_l) = \begin{cases} 1, & \text{если первичная частица в пределах } S_l, \\ 0, & \text{если первичная частица за пределами } S_l. \end{cases}$$

Умножая (28) на выражение $\exp(\alpha(t)x)$, дифференцируя по x и умножая после дифференцирования на выражение $\exp(-\alpha(t)x)$, мы находим

$$\frac{\partial \xi_1(E, t, x)}{\partial x} = -\alpha(t) \xi_1(E, t, x) + \sum_{t'=1}^N \int W^{(1)}\left(\frac{E'}{E}, t', t\right) \xi_1(E', t', x) dE'. \quad (29)$$

Вышеприведенное уравнение представляет систему N одновременных уравнений, которые получаются, если положить $t = 1, 2, \dots, N$. Для дальнейшего упрощения применим преобразования Меллина по отношению к E .

Напишем¹

$$M_s \{\xi_1(t, x)\} = \int_0^\infty E^{s-1} \xi_1(E, t, x) dE$$

и введем

$$\int_0^\infty \varepsilon^{-s} W(\varepsilon, t', t) d\varepsilon = a(s, t', t).$$

Тогда

$$\int_0^\infty E^{s-2} W^{(1)}\left(\frac{E'}{E}, t', t\right) dE = E'^{s-1} a(s, t', t).$$

Таким образом преобразование Меллина выражения (29) будет

$$\frac{\partial}{\partial x} M_s \{\xi_1(t, x)\} = \sum_{t'=1}^N (-\alpha(t) \delta_{tt'} + a(s, t', t)) M_s \{\xi_1(t', x)\}.$$

В частности, рассмотрим два случая.

Нуклонный каскад. При пренебрежении разницей между нейтронами и протонами у нас будет только один вид частиц и мы можем опустить все значения t ; имеем

$$\frac{\partial}{\partial x} M_s \{\xi_1(x)\} = (-\alpha + a(s)) M_s \{\xi_1(x)\}, \quad (30)$$

где для упрощения написано $a(s)$ вместо $a(s, 1, 1)$. Из (30) получаем [замечая, что $\alpha = \alpha(0)$]

$$M_s \{\xi_1(x)\} = M_s \{\xi_1(0)\} \exp((a(s) - \alpha(0))x). \quad (31)$$

Предположим теперь, что интервал S_l содержит частицы с энергией, превосходящей единицу. Тогда

¹ Когда мы применяем преобразование Меллина по отношению к энергии первичной частицы, интеграл, представляющий преобразование, существует для отрицательных значений s . При обычной трактовке преобразование берется по отношению к конечным энергиям, и рассматриваются положительные значения s .

$$\mathfrak{s}_1(E, 0) = \begin{cases} 1 & \text{при } E > 1, \\ 0 & \text{при } E \leq 1 \end{cases}$$

и

$$M_s \{ \mathfrak{s}_1(0) \} = \frac{1}{s}.$$

Применяя обратное преобразование Меллина выражения (31), получим

$$\mathfrak{s}_1(E, x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s_0-i\infty}^{s_0+i\infty} \frac{E^{-s}}{s} \exp \{ (a(s) - a(0)) x \} ds. \quad (32)$$

Последний интеграл может быть вычислен приближенно посредством метода перевала. Находим таким образом хорошо известное приближенное параметрическое представление

$$\mathfrak{s}_1(E, x) = \frac{\exp \{ (a(s) - a(0)) x \}}{E^s \sqrt{-2\pi \left(\frac{1}{s^2} + a''(s) \right)}}, \quad (33)$$

где

$$x = \frac{a'(s) - \frac{1}{s}}{\ln E}.$$

Подобные выражения получаются для электронно-фотонного каскада с применением асимптотических поперечных сечений и в пренебрежении потерей на ионизацию. Обозначим для электрона $t=1$ и для фотона $t=2$. Мы тогда должны вставить для $W_\nu(E_1, t_1, \dots, E_\nu, t_\nu)$ следующие значения.

а) Электрон образует фотон:

$$W_2(E, 1; E_1, 1, E_2, 2) = W_2(E, 1; E_2, 2, E_1, 1),$$

что равно половине поперечного сечения для излучения фотона с энергией E_2 электроном с энергией E , так что энергия электрона уменьшается до E_1 .

б) Фотон образует электронную пару:

$$W_2(E, 2; E_1, 1, E_2, 1);$$

это равно половине поперечного сечения образования пары фотоном с энергией E , когда один из электронов получает энергию E_1 , а другой электрон — энергию E_2 .

Таким образом, согласно (18), имеем

$$\begin{aligned} & W^{(1)}(E, t; E', t') = \\ = & \begin{cases} W^{(1)}(E, 1; E', 1) = 2 \int W_2(E, 1; E', 1, E_2, 2) dE_2 \text{ при } t=1, t'=1. \\ W^{(1)}(E, 1; E', 2) = 2 \int W_2(E, 1; E_1, 1, E', 2) dE_1 \text{ при } t=1, t'=2. \\ W^{(1)}(E, 2; E', 1) = 2 \int W_2(E, 2; E', 1, E_2, 1) dE_2 \text{ при } t=2, t'=1. \\ W^{(1)}(E, 2; E', 2) = 0 \text{ при } t=2, t'=2. \end{cases} \quad (34) \end{aligned}$$

Поперечное сечение для $t=t'=2$ равно нулю, поскольку не происходит никаких процессов, в которых фотон образовывал бы другой фотон. Вставляя в (34) известные поперечные сечения, мы получаем хорошо известное выражение для среднего числа частиц в электронно-фотонных каскадах в так называемом «А-приближении».

Пространственное распределение

9. Сначала рассмотрим среднее угловое распределение. Вследствие симметрии углов рассеяния первые производные $L_{\mu\nu}\{\psi_0(x)\}$, а также $L_{\mu}\{W^{(1)}(F, F')\}$ равны нулю для $\mu = \nu = 0$. Поэтому, дифференцируя (21) по μ или ν и вставляя затем $\mu = \nu = 0$, получим

$$\mathfrak{U}_1(F, x) = \mathfrak{Z}_1(F, x) = 0,$$

где

$$\mathfrak{U}_h(F, x) = \left(\frac{\partial^h}{\partial \mu^h} L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \mathfrak{S}_1(F, x) \} \right)_{\mu=\nu=0},$$

$$\mathfrak{Z}_h(F, x) = \left(\frac{\partial^h}{\partial \nu^h} L_{\mu-\nu x, \nu} \{ \mathfrak{S}_1(F, x) \} \right)_{\mu=\nu=0}.$$

Таким образом получаются уравнения для вторых производных. При помощи (10) имеем (мы пишем $\alpha_3(x, t)$ вместо α_3):

$$\begin{aligned} \mathfrak{U}_2(F, x) = & \varphi(F, x) \alpha_3(x, t) \Delta(F(x), S_1) + \\ & + \int_0^x d\xi \int_{F'} \varphi(F, \xi) \{ [\alpha_3(\xi, t) W^{(1)}(F(\xi), F') + A^{(1)}(F(\xi), F')] \mathfrak{S}_1(F', x - \xi) + \\ & + W^{(1)}(F(\xi), F') \mathfrak{U}_2(F', x - \xi) \} dF', \end{aligned} \quad (35)$$

где

$$A^{(1)}(F, F') = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} L_{\mu} \{ W^{(1)}(F, F') \} \right)_{\mu=0}$$

— среднее квадратичное угловое отклонение при столкновении с резким изменением энергии.

Уравнение (35) является кинетическим уравнением, выражающим среднее квадратичное угловое отклонение в общем случае. Перейдем теперь к частным случаям и рассмотрению частных решений (35) при следующих ограничениях.

1. Углы излучения не учитываются, т. е.

$$A^{(1)}(F, F') = 0^2.$$

2. Отсутствует непрерывная потеря энергии, т. е. $F(x) = F$.

3. Поперечное сечение рассеяния является таким, что

$$\alpha_3(x, t) = (\sigma_F^2 / E^2) x \text{ [см. уравнение (8)].}$$

При этих особых условиях мы можем написать

$$\begin{aligned} \mathfrak{U}_2(F, x) = & \frac{\sigma_F^2 \exp(-\alpha(t)x)}{E^2} \mathfrak{S}_1(F, 0) + \\ & + \sigma_F^2 \int_0^x \int_{F'} \exp\{-\alpha(t)(x - \xi)\} \frac{(x - \xi)}{E^2} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{S}_1(F', \xi) dF' + \\ & + \int_0^x \int_{F'} \exp\{-\alpha(t)(x - \xi)\} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{U}_2(F', \xi) dF' d\xi. \end{aligned}$$

Последнее уравнение может быть умножено на выражение $\exp(\alpha(t)x)$, продифференцировано и умножено на выражение $\exp(-\alpha(t)x)$, после чего получим

² Это приближение применяется, как правило, в случае электронно-фотонного каскада. Недавно [3] изучалось угловое распределение нуклонных каскадов, основанное на рассмотрении углов излучения.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathfrak{U}_2(F, x)}{\partial x} = & -\alpha(t) \mathfrak{U}_2(F, x) + \int_{F'} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{U}_2(F', x) dF' + \\ & + \frac{\sigma_F^2}{E^2} \exp(-\alpha(t)x) \left\{ \mathfrak{s}_1(F, 0) + \right. \\ & \left. + \int_0^x \exp(\alpha, \xi) \int_{F'} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{s}_1(F', \xi) dF' d\xi \right\}. \end{aligned}$$

При помощи (29) мы можем объединить члены в фигурных скобках и получить

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathfrak{U}_2(F, x)}{\partial x} = & -\alpha(t) \mathfrak{U}_2(F, x) + \int_{F'} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{U}_2(F', x) dF' + \\ & + \frac{\sigma_F^2}{E^2} \mathfrak{s}_1(F, x). \end{aligned} \quad (36)$$

Уравнение (35) является неоднородным уравнением, соответствующим (29), и решение (36) может быть представлено через решения (29). Действительно, пользуясь преобразованием Меллина уравнения (36), находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} M_s \{ \mathfrak{U}_2(t, x) \} = & \sum_{t'=1}^N (a(s, t, t') - \delta_{tt'} a(t')) M_s \{ \mathfrak{U}_2(t', x) \} + \\ & + \sigma_F^2 M_{s-2} \{ \mathfrak{s}_1(t, x) \}. \end{aligned}$$

Решение последней неоднородной системы дифференциальных уравнений получается в виде

$$M_s \{ \mathfrak{U}_2(x, t) \} = \sum_{t'=1}^N \int_0^x M_s \{ \sigma_1^{(t')} (x - \xi) \} M_{s-2} \{ \mathfrak{s}_1(t', \xi) \} d\xi,$$

где $\mathfrak{s}_1^{(t')}(F, x)$ для фиксированного значения t' есть решение (29) со следующим начальным условием

$$\mathfrak{s}_1^{(t')}(F, 0) \equiv \mathfrak{s}_1^{(t')}(E, t, 0) = \delta_{tt'} \sigma_F^2.$$

Преобразование Меллина может быть обращено, и мы получим следующее явное выражение:

$$\mathfrak{U}_2(E, t, x) = \sum_{t'=1}^N \int_0^x \int_{E'} \mathfrak{s}_1^{(t')}\left(\frac{E}{E'}, t, x - \xi\right) \mathfrak{s}_1(E', t', \xi) \frac{dE'}{E'^3} d\xi. \quad (37)$$

Последнее выражение было дано впервые Нордгеймом. Интересно проинтегрировать вышеприведенное выражение по x от нуля до бесконечности и таким образом вычислить угловое отклонение, усредненное по всем глубинам. Получаем

$$\int_0^\infty \mathfrak{U}_2(E, t, x) dx = \sum_{t'=1}^N \int_{E'} \left\{ \int_0^\infty \mathfrak{s}_1^{(t')}\left(\frac{E}{E'}, t, x\right) dx \right\} \left\{ \int_0^\infty \mathfrak{s}_1(E', t', x) dx \right\} \frac{dE'}{E'^3}.$$

Смещения

10. Для того чтобы получить уравнение, дающее среднее квадратичное отклонение частиц ливня, мы должны взять вторую производную от (27) по γ и положить $\mu = \gamma = 0$. Находим

$$\begin{aligned} \mathfrak{Z}_2(F, x) = & \varphi(F, x) \alpha_1(x, t) \Delta(F(x), S_l) + \\ & + \int_0^x \varphi(F, \xi) \int_{F'} W^{(1)}(F(\xi), F') \mathfrak{Z}_2(F', x - \xi) dF' d\xi + \\ & + \int_0^x \varphi(F, \xi) \int_{F'} \{(\alpha_3(\xi, t)(x - \xi)^2 + 2\alpha_2(\xi, t)(x - \xi) + \alpha_1(\xi, t) W^{(1)}(F(\xi), F') + \\ & + (x - \xi)^2 A^{(1)}(F(\xi), F'))\} \mathfrak{Z}_1(F', x - \xi) dF' d\xi. \end{aligned}$$

Решение вышеприведенного уравнения в тех же приближениях, которыми мы пользовались выше, имеет вид

$$\mathfrak{Z}_2(E, t, x) = \sum_{l=1}^N \int_0^x \int_{E'} \mathfrak{Z}_1^{(l')} \left(\frac{E}{E'}, t; x - \xi \right) \mathfrak{Z}_1(E', t', \xi) \frac{dE'}{E'^3} \xi^2 d\xi dE'. \quad (38)$$

Вторые моменты по отношению к u

Для второй производной G напомним

$$\left(\frac{\partial^2 G(F; S^k; x, u)}{\partial^2 u_l} \right)_{u=1} = \mathfrak{S}_2(F, S_l, x),$$

где $\mathfrak{S}_2(F, x)$ — среднее квадратичное число частиц в интервале S_l на глубине x , образованных первичной частицей с энергией E и типа t . Рассматривая эти моменты, мы пренебрегаем поперечным распределением ливня. По аналогии мы можем написать

$$\left(\frac{\partial^2 G(F; S^k; x; u)}{\partial u^l \partial u^m} \right)_{u=1} = \mathfrak{S}_{11}(F, S_l, S_m, x),$$

где $\mathfrak{S}_{11}$ представляет собой среднее значение произведения числа частиц в интервалах S_l и S_m . Соотношение между этими числами выражается посредством

$$K(F, S_l, S_m, x) = \mathfrak{S}_{11}(F, S_l, S_m, x) - \mathfrak{S}_1(F, S_l, x) \mathfrak{S}_1(F, S_m, x).$$

Для простоты, там, где это допустимо, опустим выражения для интервалов. Таким образом напомним просто

$$\mathfrak{S}_2(F, x) \text{ и } \mathfrak{S}_{11}(F, x).$$

Дифференцируя G -уравнение (26) работы [1] дважды по u_l и полагая затем $u = 1$, находим

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_2(F, x) = & \int_0^x \int_{F'} \int_{F''} \varphi(F, \xi) W^{(2)}(F(\xi), F', F'') \mathfrak{S}_1(F', x - \xi) \mathfrak{S}_1(F'', x - \xi) dF'' dF' + \\ & + \int_0^x \int_{F'} \varphi(F, \xi) W^{(1)}(F(\xi), F') \mathfrak{S}_2(F', x - \xi) d\xi dF', \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$W^{(2)}(F, F', F'') = W_2(F, F', F'') + \sum_{v \geq 0} \binom{v+2}{2} \int_{\mathfrak{F}^v} W_{v+2}(F, F', F'', \mathfrak{F}^v) d\mathfrak{F}^v.$$

Вышеприведенное уравнение может быть решено численным интегрированием при условии, что уже известны первые моменты. Решение может быть записано явно для однородного уравнения для случая отсутствия непрерывной потери энергии. Действительно, предположим

$$F(x) = F, \quad \varphi(F, x) = \exp(-\alpha(t)x), \quad (40)$$

$$W_2(F, F', F'') = \frac{1}{F^2} \varpi\left(\frac{F'}{F}, \frac{F''}{F}, t, t', t''\right). \quad (41)$$

Из (40) следует, что мы можем применить вместо (26) [1] уравнение (27) [1]. Таким образом мы можем написать

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{S}_2(F, x) + \alpha(t) \mathfrak{S}_2(F, x) = \int_{F'} W^{(1)}(F, F') \mathfrak{S}_2(F', x) dF' + Q(F, x), \quad (42)$$

где

$$Q(F, x) = \int_{F'} \int_{F''} W^{(2)}(F, F', F'') \mathfrak{S}_1(F', x) \mathfrak{S}_1(F'', x) dF' dF''. \quad (43)$$

Мы видим, что вышеприведенное неоднородное уравнение соответствует однородному уравнению, описывающему изменение $\mathfrak{S}_1(F, x)$. Неоднородный член содержит первый момент, а второй момент легко можно получить, если известен момент первого порядка. Легко видеть, что таким же образом можно получить моменты n -го порядка посредством моментов степеней меньших, чем n .

Преобразование Меллина уравнения (42) можно написать

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \alpha(t)\right) M_s\{\mathfrak{S}_2(t, x)\} = \sum_{t'=1}^N \alpha(s, t, t') M_s\{\mathfrak{S}_2(t', x)\} + M_s\{Q(t, x)\}.$$

Решение вышеприведенного уравнения получается обычным путем. Находим

$$M_s\{\mathfrak{S}_2(t, x)\} = \sum_{t'=1}^N \int_0^x M_s\{\mathfrak{S}_1(t, t', x - \xi)\} M_s\{Q(t', \xi)\} d\xi, \quad (44)$$

где $\mathfrak{S}_1(t, t', x - \xi)$ относится к тому решению однородного уравнения (39), которое удовлетворяет начальному условию

$$M_s\{\mathfrak{S}_1(t, t', x = 0)\} = \begin{cases} 1, & \text{если } t = t', \\ 0, & \text{если } t \neq t'. \end{cases}$$

Таким образом $\mathfrak{S}_1(E, t, t', x)$ есть решение, где

$$\mathfrak{S}_1(E, t, t', x = 0) = \delta(E - 1) \delta_{tt'}.$$

Мы можем применить к (44) обратное преобразование Меллина; получаем

$$\mathfrak{S}_2(t, x) = \sum_{t'=1}^N \int_0^x d\xi \int_0^E \mathfrak{S}_1\left(\frac{E}{E'}, t, t', x - \xi\right) Q(E', t', \xi) \frac{dE'}{E'}. \quad (45)$$

Наконец, при помощи определений Q получаем явное выражение для второго момента, а именно

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_2(E, t, x) = & \sum_{t', t'', t'''=1}^N \int_0^x d\xi \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \mathcal{S}_1\left(\frac{E}{E'}, t, t', x-\xi\right) W^{(2)}(E', t'; E'', t''; E''', t''') \times \\ & \times \mathcal{S}_1(E'', t'', \xi) \mathcal{S}_1(E''', t''', \xi) \frac{dE' dE'' dE'''}{E'} . \end{aligned}$$

Последнее выражение интересно по форме, однако оно не подходит для практических численных расчетов. Удобные для расчетов формулы получаются, если ввести выражения для первых моментов в (44) и произвести над ним обратное преобразование Меллина, вычисляя его посредством интегрирования методом перевала. Различными авторами проведены довольно трудоемкие вычисления в этом направлении.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Ниже приводятся некоторые численные результаты, которые были получены и опубликованы ранее. Приводимые здесь результаты относятся к так называемому «А-приближению» теории электронно-фотонных каскадов. Это приближение рассматривает только столкновения электронов с излучением фотонов и образование электронных пар фотонами. Соответствующими поперечными сечениями являются: поперечное сечение для образования фотона с энергией в интервале $E', E' + dE'$ первичным электроном с энергией E на пути dx

$$2W_2(E, 1; E', 2, E - E', 1) = H(E, E') \frac{E' dE'}{E^2} \frac{dx}{C(Z)} ; \quad (46)$$

далее, поперечное сечение для образования пары электронов фотоном с энергией E на пути dx , причем один из электронов имеет энергию в интервале $E', E' + dE'$, которое дается выражением

$$2W_2(E, 2; E', 1, E - E', 1) = 2H(E', E) \frac{dE'}{E} \frac{dx}{C(Z)} , \quad (47)$$

где

$$H(E, E') = 1 - \left(\frac{4}{3} + \alpha_0\right) \left(\frac{E}{E'} - \frac{E^2}{E'^2}\right);$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{9 \lg 183Z^{-1/3}} \quad (\text{принимается равной } 0,0246 \text{ в ходе вычислений}),$$

$$\frac{1}{C(Z)} = \frac{4NZ^2}{137} r_0^2 \ln(183Z^{-1/3}),$$

$r_0 = e^2 / m_e c^2$ (классический радиус электрона $= 2,8 \cdot 10^{-13}$ см), N — число атомов на каждый см³ поглотителя и Z — его атомный номер, $C(Z)$ — так называемая каскадная единица.

Поперечные сечения (46) и (47) представляют собой так называемые асимптотические поперечные сечения, действительные для

$$E(E - E')/E' \gg 137 m_e c^2 Z^{-1/3}.$$

Из вышеприведенных поперечных сечений можно вывести уравнения для преобразований Меллина средних чисел [см. уравнение (31) для $N=1$; аналогичные выражения могут быть выведены из (29) для $N=2$ в случае электронно-фотонного каскада]. Особая трудность в рассмотрении электронно-фотонного каскада состоит в том, что поперечное

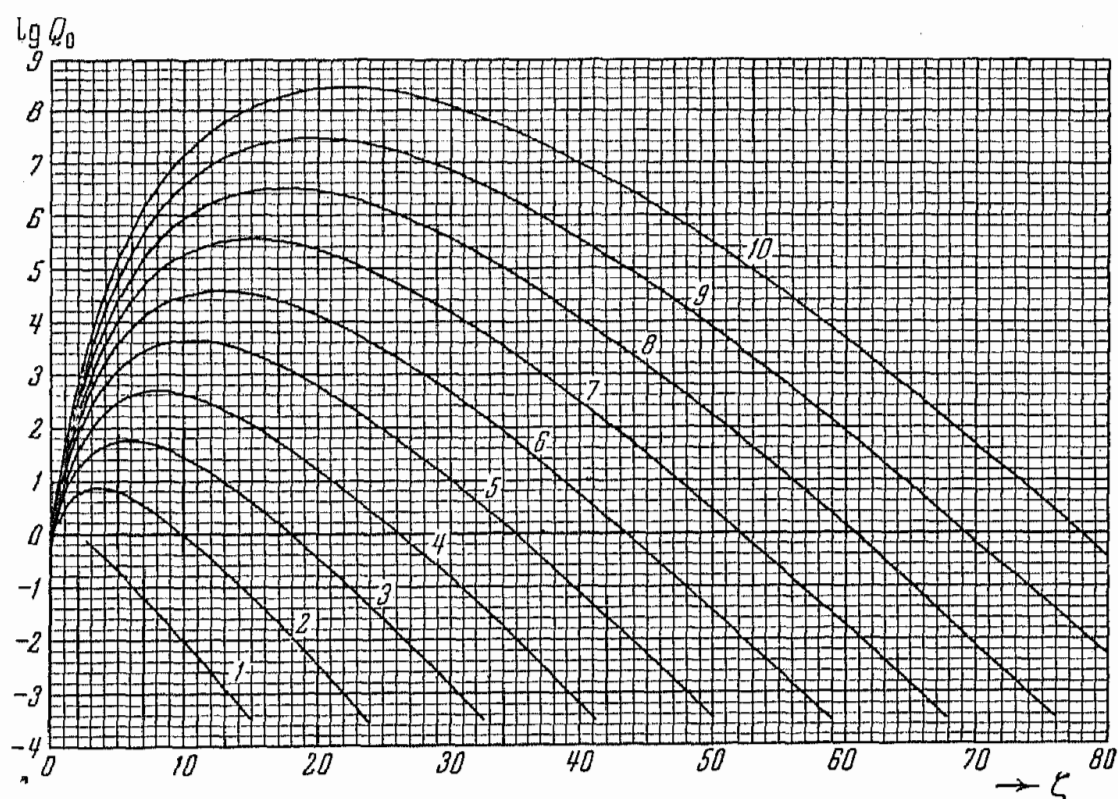


Рис. 1. Среднее число электронов Q_0 с энергией, большей E , образованных первичным электроном с энергией E_0 . Глубина ζ измеряется в каскадных единицах. Значения $\epsilon = \lg(E_0/E)$ указаны на кривых

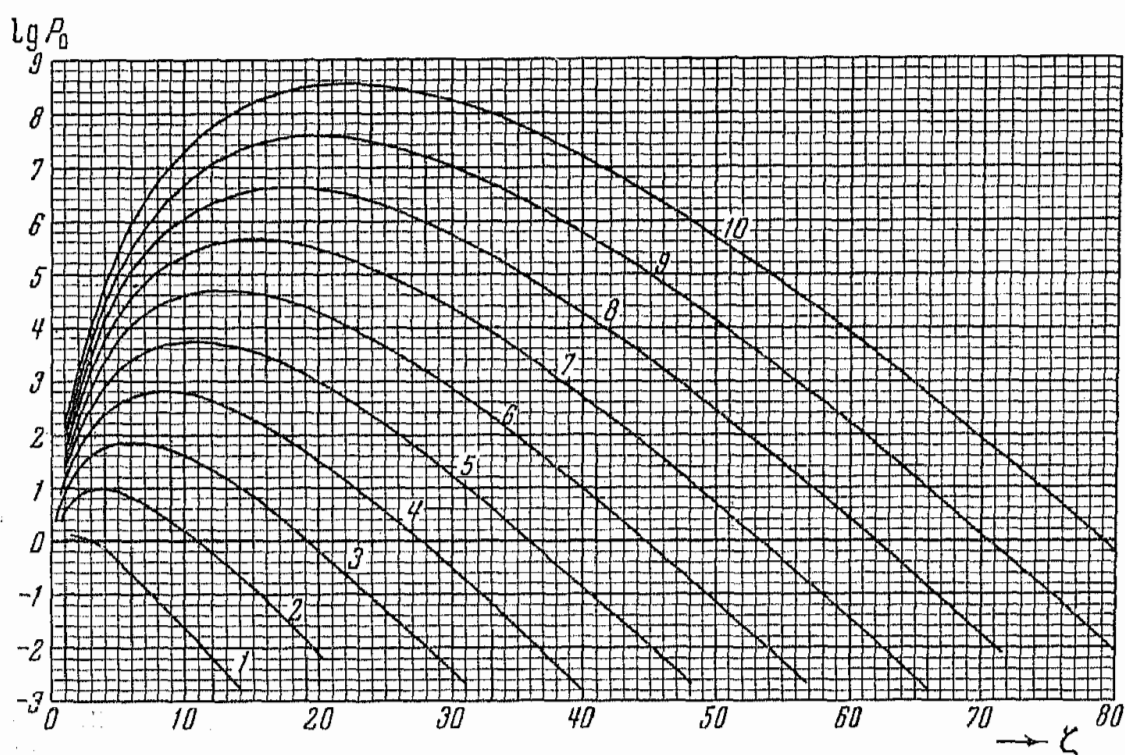


Рис. 2. Среднее число фотонов P_0 с энергией, большей E , образованных электроном с энергией E_0 («А-приближение»). ζ — глубина в каскадных единицах. Значения $\epsilon = \lg(E_0/E)$ указаны на кривых

нов и фотонов. Как видно из рис. 4, корреляция равняется нулю при ζ_0 , но для меньших или больших глубин она положительна, исключая случаи высоких энергий и малых глубин, где она отрица-

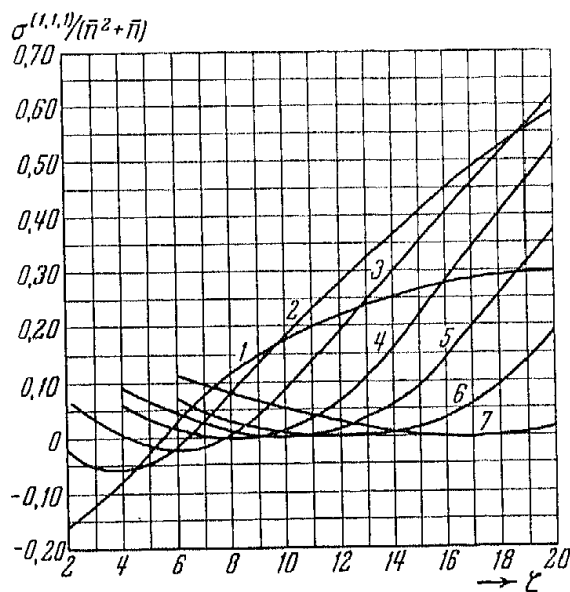


Рис. 3. Стандартное отклонение. Зависимость коэффициента $\sigma^{(1,1,1)}/(\bar{n}^2 + \bar{n})$ от глубины ζ (в каскадных единицах) для различных энергий. Значения $-\lg \epsilon$ указаны на кривых

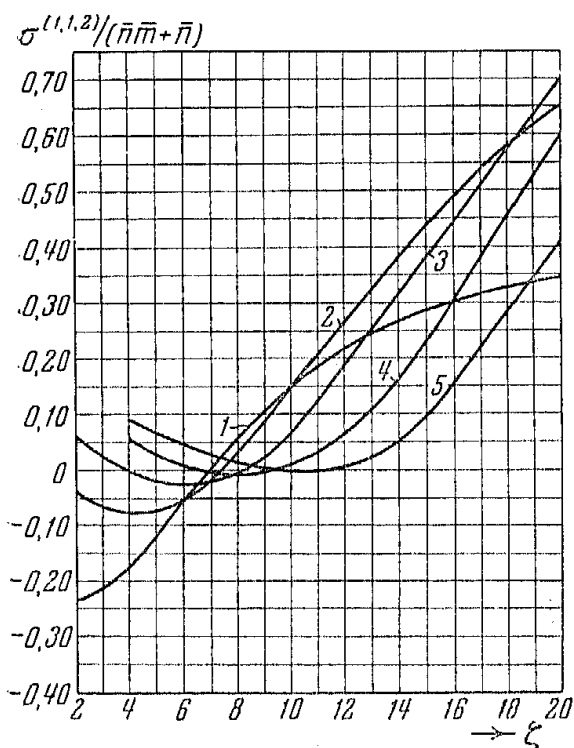


Рис. 4. Коэффициент корреляции. Зависимость коэффициента $\sigma^{(1,1,2)}/(\bar{n}\bar{m} + \bar{n})$ от глубины ζ (в каскадных единицах) для различных энергий. Значения $-\lg \epsilon$ указаны на кривых

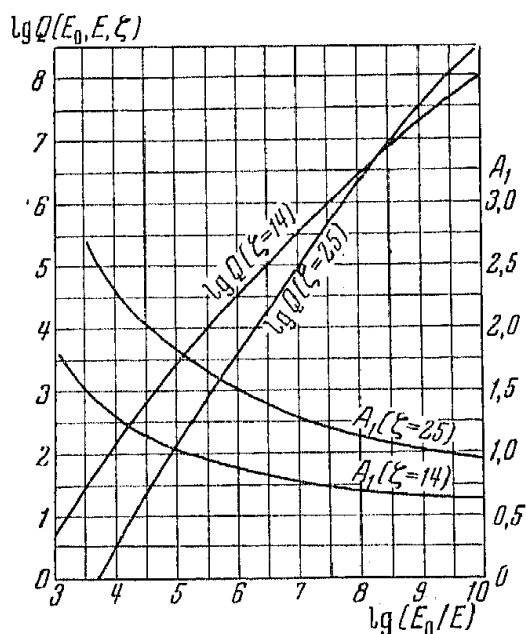


Рис. 5. Зависимость поперечного распределения ливней от энергии

тельна. Сравнение рис. 1 и 2 с рис. 3 и 4 показывает, что глубина ζ_0 , на которой вторые моменты имеют минимум, совпадает с максимумом соответствующих первых моментов.

Интерпретация вторых моментов дана в работе [6].

На рис. 5 воспроизведено среднее квадратичное поперечное распределение электронов в ливне, взятое из [6] (ср. также [7]). Вычисление при этом основано на «А-приближении» и распределение, связанное с углами излучения, не учитывается. Таким образом рассматривались только эффекты упругого рассеяния электронов в атмосфере. Кроме того, изменение плотности воздуха с глубиной также не учитывалось. Рассеяние, таким образом, определено по формуле, эквивалентной (38) настоящей работы.

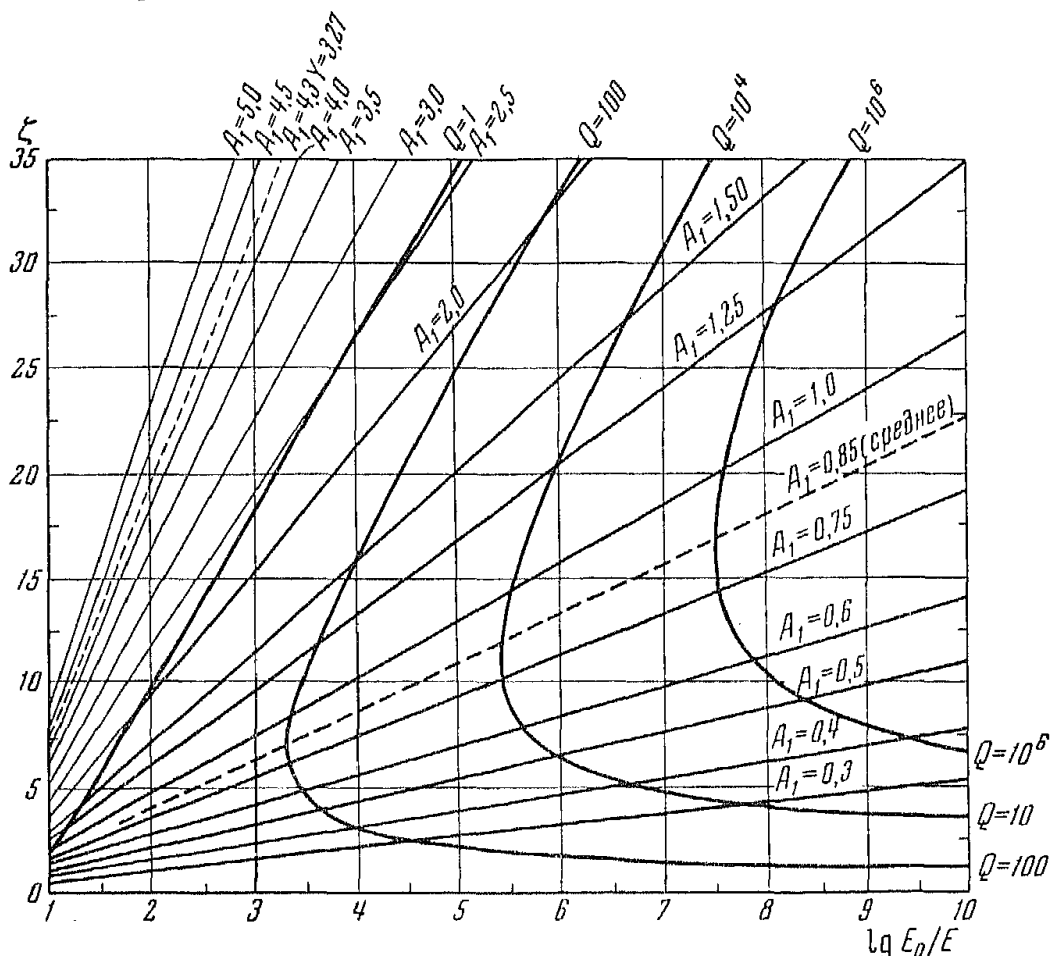


Рис. 6. Поперечное распределение ливней в воздухе. Прямые линии дают места постоянного распределения в переменных $\lg(E_0/E)$; ζ . Показаны также линии, соответствующие постоянному размеру ливней ($Q = 1, 10^2, 10^4, 10^6$)

В этом приближении среднее квадратичное отклонение частиц с энергией $> E$ дается в виде

$$\mathfrak{Z}_2(E_0, \zeta) = \langle Z^2 \rangle = A_1^2 \left(\frac{E_1}{E} \right)^2 \text{ каскадных единиц, где} \\ E_1 = 2 \cdot 10^7 \text{ eV.}$$

A_1 как функция энергии и глубины показана на рис. 5 для $\zeta = 14$ и $\zeta = 25$, а также на рис. 6 для различных энергий и глубин. Как на рис. 5, так и на рис. 6 дано также число частиц, связанных с отклонением, характеризуемым величиной A_1 .

Центральный научно-исследовательский
институт физики
Будапешт

Поступила в редакцию
13 августа 1953 г.

Литература

- [1] Л. Яноши. ЖЭТФ, 26, 386, 1954.— [2] B. Rossi a. K. Greisen. Rev. Mod. Phys., 13, 240, 1941.— [3] H. Messel a. H. S. Green. Phys. Rev., 87, 738, 1952.— [4] L. Janossy. Cosmic Rays, Clarendon Press, Oxford, 1950.— [5] L. Janossy a. H. Messel. Proc. Phys. Soc., 63, 1101, 1950.— [6] L. Janossy. Proc. Phys. Soc., 63, 1009, 1950.— [7] A. Borsellino. Nuovo Cim., 6, 6, 1949.

ВАРИАЦИИ ИНТЕНСИВНОСТИ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ И РОЛЬ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ¹

Л. И. Дорман, А. И. Кузьмин, Г. В. Тянутова,
Е. Л. Фейнберг и Ю. Г. Шафер

Дано краткое изложение результатов экспериментального и теоретического изучения влияния метеорологических факторов на наблюдаемую (на уровне моря) интенсивность жесткой компоненты космических лучей. Показано, что, зная распределение температуры атмосферы над точкой наблюдения, можно учитывать метеорологический фактор с точностью до 0,1—0,2% в интенсивности космических лучей (причем остающееся расхождение лежит в пределах погрешности данных метеорологического зондирования).

Оказывается, что (с этой точностью) сезонные вариации интенсивности жесткой компоненты полностью обуславливаются метеорологическими факторами. Суточные изменения этими факторами существенно маскируются.

Изучение вариаций интенсивности космических лучей представляет значительный интерес. Во-первых, некоторые из них обусловлены изменениями в земной атмосфере, и поэтому отсюда можно извлечь сведения о характере взаимодействия космических лучей с веществом, о природе частиц в космических лучах. Во-вторых, надежно исключив эти вариации геофизического происхождения, можно получить сведения, необходимые для выяснения вопроса о механизме и месте генераций космических лучей. В-третьих, знание характера связей вариаций интенсивности космических лучей с солнечной деятельностью, с состоянием магнитного поля Земли и колебаниями метеорологических параметров поможет дальнейшему изучению этих явлений.

В 1928 г. Мысовский [1] открыл барометрический эффект, оказавшийся убедительным подтверждением внеземного происхождения космических лучей. Это была первая работа в СССР по изучению вариаций интенсивности космических лучей. За последние годы при изучении этого вопроса был получен ряд теоретических и экспериментальных результатов; изложение некоторых из них составляет основное содержание настоящей статьи.

Изучению чаще всего подвергается жесткая компонента космических лучей. К числу периодических колебаний ее интенсивности относятся 11-летние (вековые), сезонные (годовые), 27-дневные (месячные) и суточные колебания. Сезонные вариации в пределах северной части СССР достигают 5%, остальные (кроме вековых) на порядок слабее (измеряются десятками долями процента). Как для объяснения взаимодействия с атмосферой, так и для проблемы происхождения космических лучей важно, прежде всего, выделить вариации интенсивности жесткой компоненты космических лучей, связанные с метеорологическими изменениями в земной атмосфере.

В 1937 г. Блэккет [2] указал на существование наряду с барометрическим температурного эффекта для мезонов, сводящегося по Блэк-

¹ Доложено на Совещании по физике космических лучей в Москве 13 июня 1952 г.

кету к тому, что при нагревании атмосферы (например, летом) она расширяется, уровень генерации мезонов при этом поднимается и распад мезонов увеличивается. Этим можно объяснить порядок величины наблюдаемых явлений на уровне моря. Однако в последующих зарубежных экспериментальных работах [3-5] и многих других более ранних (число которых измеряется десятками) на основе точных многолетних измерений вариаций интенсивности жесткой компоненты космических лучей делались безуспешные попытки путем уточнения температурного эффекта объяснить сезонные изменения интенсивности космических лучей метеорологическими эффектами.

В настоящее время этот вопрос в зарубежной литературе чрезвычайно запутан. Достаточно сказать, что в обзоре 1952 г. [6], например, в статье Долбира и Эллиота, показывается, что в сезонных вариациях после учета распада мезонов будто бы остается столь же сильный сезонный эффект обратного знака (так называемый положительный температурный эффект). Эффект такого знака действительно должен получаться, если учесть конкуренцию между распадом и захватом π -мезонов, порождающих μ -мезоны, но он должен быть в несколько (до трех) раз меньше вычисленного этими авторами и в работе [4] из наблюдений.

Однако весь вывод о том, что учет распада мезона не устраняет сезонного эффекта и даже усиливает его, как мы увидим, основан на недоразумении. Значительную роль в создании такого недоразумения играет следующее обстоятельство.

Метеорологические эффекты обычно сводятся к двум: барометрическому (простое увеличение поглощения мезонов при росте массы вещества над установкой) и температурному (сдвиг уровня генерации мезонов при изменении температуры атмосферы). При расчете температурного эффекта возникает вопрос: какую температуру атмосферы здесь следует учитывать? Между уровнем моря и уровнем генерации температура атмосферы различается на 60—80°, и изменения ее на разных уровнях неодинаковы. Так, на уровне моря летом теплее, чем зимой, на уровне же генерации в ряде мест земного шара (Англия, Северная Америка) летом холоднее. На уровне моря в Сибири холоднее, чем на экваторе, а в стратосфере — теплее и т. п.

В ряде работ при расчете температурного эффекта делались необоснованные попытки вычислить так называемый «единый» температурный коэффициент из изменения температуры приземного слоя атмосферы, или, наоборот, ее стратосферной части, или средней из этих двух температур, или средней из температур некоторой части атмосферы. При этом получались взаимно противоречивые результаты.

Между тем вопрос, как было показано еще в 1946 г. [7], допускает простое и общее решение.

Прежде всего, следует обратить внимание на то, что кроме барометрического эффекта и эффекта сдвига уровня генерации мезонов есть еще один столь же существенный эффект: время жизни мезона зависит от его энергии. Поэтому вероятность распада растет по мере приближения мезона к Земле из-за ионизационных потерь. Весьма существенно, где — в начале или в конце пути — мезон потеряет эту энергию. Другими словами, вероятность дохождения до Земли меняется при перераспределении масс даже при постоянной высоте уровня генерации. Поэтому учет неравновесности атмосферы при анализе эксперимента обязателен.

Учет изменения метеорологических факторов, как может быть легко показано, в действительности определяется для вертикального потока мезонов следующей формулой, в которой мы пренебрегаем лишь размазанностью уровня генерации и конкуренцией между распадом и захватом π -мезонов, порождающих μ -мезоны [7]:

$$\frac{\delta N_\mu}{N_\mu} = A \delta h_0 + B \int_{h_1}^{h_0} \frac{\delta T(h') dh'}{h' [c p_1 - a(h' - h_1)] T(h')} \quad (1)$$

Здесь N_μ — вероятность дохождения μ -мезонов до точки наблюдения и δN_μ — ее изменение; δh_0 — изменение давления в точке наблюдения; h_1 — давление в точке генерации, где импульс частицы p_1 ; a — ионизационные потери на г/см² воздуха; $\delta T(h')$ — изменение температуры T в точке с давлением h' ; A , B — коэффициенты, зависящие от массы μ -мезона m , его времени жизни в покое τ_0 , температуры и плотности воздуха в точке наблюдения $\rho(h_0)$,

$$A = \frac{mc^2}{\rho(h_0) \tau_0 c p_1 + a(h_0 - h_1)}; \quad B = \frac{mc^2}{c \tau_0} \frac{h_0}{\rho(h_0)}.$$

В формуле (1) первый член ее дает барометрический эффект, во втором же заключено сложное влияние изменений температуры в неравновесной атмосфере.

В 1949—50 г. после усреднения по спектру мезонов и по углам формула (1) была распространена на случай глобальной интенсивности. До последнего времени эта обобщенная формула и использовалась нами для теоретического предсказания метеорологического эффекта и позволила получить важный результат: было показано, что сезонный ход интенсивности жесткой компоненты космических лучей I почти нацело объясняется влиянием метеорологических факторов. Ввиду этого возникла необходимость дальнейшего уточнения формулы (1).

В начале 1952 г. формула (1) была вновь обобщена [8] на двухмезонную схему, основанную на предположении, что μ -мезоны появляются в результате распада π -мезонов, генерируемых первичной компонентой в толще атмосферы, которые могут как распадаться, так и захватываться ядрами. Этим учитывается так называемый положительный температурный эффект. Вносимое возможностью захвата π -мезонов изменение, вообще говоря, невелико; оно значительно только для больших глубин под землей. Подтверждение правильности такой гипотезы можно видеть в том, что спектр генерации π -мезонов, полученный из сравнения теоретического высотного хода μ -мезонов с экспериментальным (с использованием известных данных Григорова [9]), хорошо согласуется со спектром генерации Поуэлла [10].

На основе полученных формул были построены вспомогательные графики, по которым, зная температурный разрез атмосферы и давление в точке наблюдения, можно легко рассчитать изменение интенсивности космических лучей δN_μ , обусловленное изменением метеорологических факторов. По этой теоретической схеме производилась обработка данных непрерывной регистрации колебаний интенсивности космических лучей для исключения влияния метеорологического эффекта. Экспериментальные данные колебаний глобальной интенсивности жесткой компоненты космических лучей мы получили с большой точностью — до нескольких сотых долей процента за один час наблюдения.

Из этих данных изменений интенсивности жесткой компоненты космических лучей в двух различных пунктах Советского Союза мы получили кривые сезонного хода интенсивности космических лучей. Значения этих вариаций интенсивности космических лучей измерялись в те же часы, в которые производилось радиозондирование атмосферы, и, следовательно, в те же часы, для которых производился расчет δN_μ . Таким образом одновременно с наблюдением сезонного хода интенсивности жесткой компоненты δI при помощи вышеуказанных схем расчетов и данных радиозондирования

мы получили теоретически ожидаемый сезонный ход δN_μ , обусловленный чисто метеорологическими причинами.

Для пункта № 1 (измерения 1951—1952 гг.) кривые сезонного хода δI и δN_μ представлены на рис. 1, где сплошной кривой показан теоретически ожидаемый сезонный ход интенсивности δN_μ , рассчитанный по метеорологическим данным, а точками — экспериментальные данные непрерывной регистрации δI .

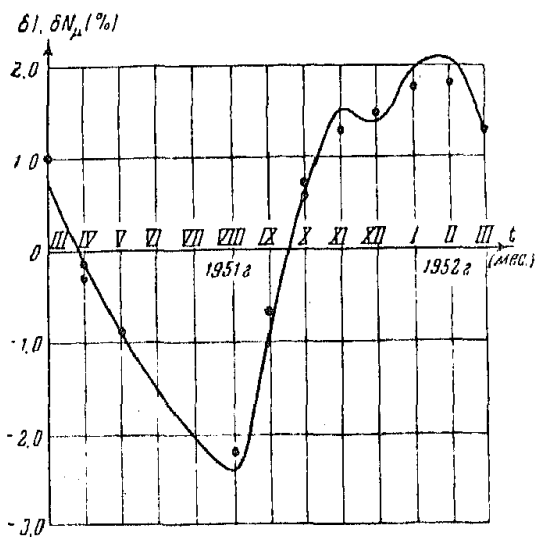


Рис. 1

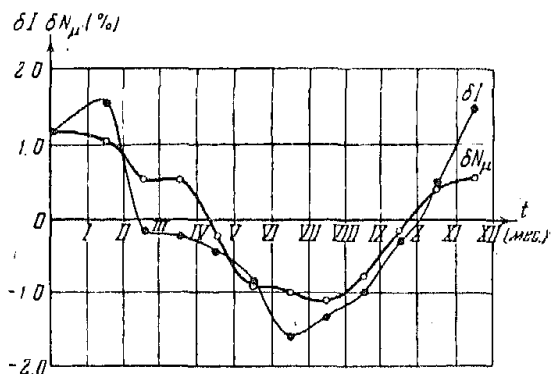


Рис. 2

Рис. 1. Сплошная линия — кривая сезонного хода вариаций δN_μ интенсивности жесткой компоненты космических лучей, обусловленного метеорологическими факторами, вычисленная по [8] из данных метеорологического зондирования атмосферы над пунктом № 1 (СССР), ● — экспериментальные данные вариаций интенсивности δI , измеренные в том же пункте за те же сроки. Средние статистические ошибки измерения интенсивности $\sigma(\delta I) = \pm 0,07\%$; ошибки в вычисленных значениях, обусловленные в основном ошибками в измерении метеорологических данных, $\sigma(\delta N_\mu) = \pm 0,08\%$

Рис. 2. Кривые сезонного хода δI по данным измерений в Челтенхеме (США) и предвычисленных из метеорологических данных радиозондирования атмосферы над районом Челтенхема вариаций интенсивности δN_μ . Расчет производился по упрощенной (однозонной) схеме [7]

Кроме того, был получен, с использованием этой же методики, сезонный ход δN_μ для станции Челтенхем вблизи Вашингтона (США) и сравнен (рис. 2) с опубликованными данными непрерывной регистрации δI на этой станции за 10 лет, причем для расчетов, производившихся по более грубой формуле (1) (однозонная схема), были использованы данные радиозондирования атмосферы над Вашингтоном [11].

Результаты измерений и расчетов представлены также в следующей таблице:

Пункт наблюдения	Время наблюдения	Сезонный эффект (амплитуда годового хода)		Коэффициент корреляции
		Измерено, %	Вычислено по метеоролог. данным, %	
СССР, пункт № 1	1951—1952	2,0	2,2	$0,99 \pm 0,004$
СССР, пункт № 2	1949—1950	5,0	4,9	$0,91 \pm 0,03$
СССР, пункт № 2	1951—1952	3,6	3,4	$0,92 \pm 0,014$
США, г. Челтенхем	1937—1946	1,4	1,3	$0,89 \pm 0,03$

Остающаяся разница $\delta I - \delta N_\mu$ порядка 0,1—0,2% не выходит за пределы погрешностей измерений температуры атмосферы и измерений δI .

Таким образом мы можем утверждать, что с указанной точностью сезонный эффект для жесткой компоненты космических лучей полностью объясняется метеорологическими факторами. Однако авторы ра-

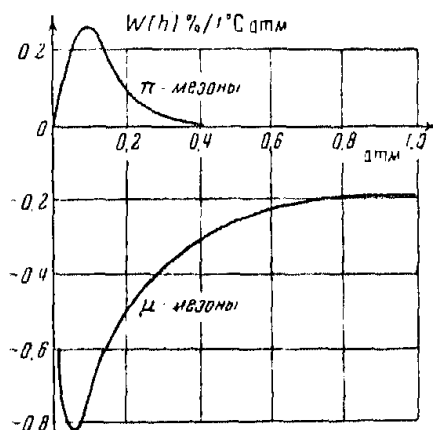


Рис. 3

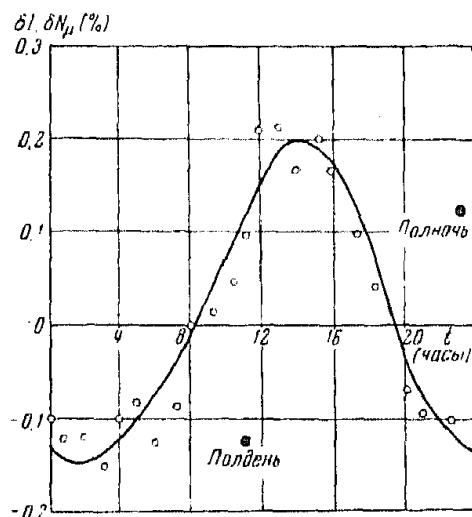


Рис. 4

Рис. 3. Плотность температурного коэффициента $W(h')$ для μ - и π -мезонов. Кривые указывают для каждого уровня коэффициент, на который следует умножить изменение температуры в данной точке $\delta T(h')$. Проинтегрировав это произведение по высоте h' , получаем величину, соответствующую второму члену в формуле (1) для случая наблюдений на уровне моря. Использование одной только нижней кривой дает эффект для «одномезонной схемы». Верхняя кривая дает вклад (имеющий обратный знак) от конкуренции между захватом и распадом π -мезонов. Полный эффект дается суммой обеих кривых:

$$\delta N_\mu = \int_0^{h_0} W(h') \delta T(h') dh'$$

Рис. 4. Суточный эффект вариаций интенсивности жесткой компоненты космических лучей, полученный усреднением данных измерений (СССР, пункт № 2) за 1949—1952 гг. (светлые кружки). Черными кружками обозначены теоретически ожидаемые изменения интенсивности мезонной компоненты δN_μ , обусловленные метеорологическими факторами, вычисленные из усредненных данных ежесуточного метеорологического зондирования атмосферы в указанные часы. Средняя ошибка измерений δI равна $\pm 0,02\%$

боты [3], вводя, как мы говорили, поправку на распад мезонов, не скомпенсировали измеренные вариации, а получили остаточный сезонный эффект такой же абсолютной величины (1,8%), как измеренный, но обратного знака. Как легко показать [12], причина этого лежит в неправильном учете влияния распада μ -мезонов, при котором не принимается во внимание температурное распределение атмосферы. Неполный учет влияния метеорологических факторов в работе [4] привел к ошибочной интерпретации положительного температурного эффекта, который был объяснен эффектом π -мезонов. На деле полученный в [4] результат объясняется (см. [12]) в основном тем, что автор не учитывал эффекта перераспределения масс и эффекта размазанности уровня генерации, играющих особую роль из-за того, что в пункте измерений работы [4] температура в стратосфере имеет сезонный ход, обратный сезонному ходу наземной температуры.

Теоретические расчеты показывают, что для интенсивности космических лучей, наблюдаемой на уровне моря, эффект изменения температуры на большой высоте на π -мезонах сказывается в 4—5 раз слабее,

чем на μ -мезонах; поэтому температурный эффект атмосферы — отрицательный (рис. 3).

Неправильный учет метеорологических факторов, в частности пренебрежение указанным выше эффектом перераспределения масс, привел в свое время и автора работы [5] к ошибочному выводу о том, что сезонные изменения интенсивности космических лучей не сводятся к метеорологическим и наполовину объясняются, по его терминологии, «вариациями второго рода» (мировыми вариациями). Наши результаты, повидимому, опровергают этот вывод.

С той же ошибкой связаны и выводы, сделанные в [13], где было получено, что существенная часть широтного эффекта интенсивности космических лучей сводится к метеорологическому эффекту. Расчеты по выше сформулированной схеме дали иные результаты, которые определенно показывают, что широтный метеорологический эффект интенсивности космических лучей на уровне моря не превышает 3—4%, а на высоте 10 км он не более 1% [14].

Суточные изменения интенсивности космических лучей на порядок меньше сезонных и изучение их требует гораздо большей тщательности в определении суточных изменений температуры атмосферы на различных уровнях. Кроме того, отделение метеорологических факторов в суточном ходе космических лучей требует круглосуточного многократного радиозондирования, значительно более частого и более прецизионного, чем это пока производилось метеорологами.

Проведенные нами в СССР прецизионные наблюдения позволили получить большой и достаточно надежный материал, ясно показывающий существование суточного эффекта в интенсивности жесткой компоненты космического излучения с амплитудой 0,2%, с максимумом около полудня (рис. 4). Из рис. 4 видно, что две предвычисленные по метеорологическим данным точки для δN_{μ} в полдень и в полночь находятся в противофазах, соответствующих точкам наблюденного суточного хода (в отличие от результата работы [3], ошибочность которого показана в [12]).

Результаты наблюдений и расчеты для пункта № 2 показали, что после введения поправки на метеорологический эффект амплитуда суточного хода I примерно удваивается (0,4%). Однако ошибки дневных измерений температуры высоких слоев атмосферы, обусловленные радиационным нагреванием радиозондов, в настоящее время еще настолько велики, что этот вывод нуждается в дальнейшей тщательной проверке. Если этот вывод верен, то он означает, что суточный эффект вариации I неметеорологического происхождения, имеющий обратный знак метеорологическому, действительно существует и имеет амплитуду около 0,3—0,4%.

В связи с вопросом о суточном эффекте в изменениях I особый интерес представляет учет влияния изменений состояния так называемого озонного слоя. По предварительным экспериментальным данным измерений температуры озонного слоя оказывается, что амплитуда суточных колебаний его температуры достигает значительной величины и по знаку противоположна амплитуде колебаний температуры приземного слоя воздуха.

По теоретическим расчетам основная доля суточного хода δI могла бы быть объяснена перераспределением масс в озонном слое и в сопряженных с ним верхних слоях атмосферы, если бы колебания температуры озонного слоя достигали 70—100°. Однако экспериментальные данные не дают основания для подобных предположений.

Заметим, что уже ранее были выполнены некоторые эксперименты (см., например, [3]), в которых автоматически исключалось влияние метеорологических факторов. Измерения интенсивности космических лучей производились на средних широтах двумя телескопами, один из:

которых был направлен параллельно земной оси, а другой — перпендикулярно ей. Таким образом, несмотря на суточное вращение Земли, первым телескопом все время измерялась интенсивность излучения, идущего примерно из одной точки неба, другой же телескоп за сутки собирал излучение, идущее из разных точек неба. Поэтому разность даваемых двумя телескопами показаний, из которой метеорологический эффект выпадает, должна давать чистый суточный эффект внеземного происхождения. Измерения, проведенные в [3], дают указание на существование такого суточного эффекта в интенсивности космических лучей с амплитудой, по крайней мере, равной около 0,1 %.

К рассмотренной группе вопросов примыкают непериодические изменения, связанные с прохождением метеорологических фронтов, являющихся границами раздела различных воздушных масс. Собранный к настоящему времени в пункте № 2 большой экспериментальный материал позволил надежно подтвердить существование так называемого «эффекта фронтов» (замеченного в работе [15]) в δI порядка $0,3 \div 0,8\%$. Результаты находятся во всяком случае в качественном и даже полуколичественном согласии с теоретическими представлениями, изложенными выше.

Более точный теоретический количественный анализ затруднен из-за отсутствия достаточно прецизионных экспериментальных данных по температуре атмосферы и измерению интенсивности жесткой компоненты космических лучей за малые интервалы времени.

К числу непериодических вариаций, возможно, метеорологического характера, относятся также малые (порядка $0,2 \div 0,3\%$) возрастания интенсивности жесткой компоненты космических лучей во время прекращения радиосвязи и небольших солнечных вспышек. Эти явления сопровождаются увеличением потока ультрафиолетовой радиации, что может приводить к понижению температуры озонного слоя на несколько десятков градусов. Такое понижение температуры вызовет, в свою очередь, некоторое возрастание интенсивности космических лучей. Этот вывод, в частности, объясняет тот факт, что эффекты малых солнечных вспышек в космических лучах наблюдаются лишь на дневной стороне Земли.

Однако вывод о метеорологическом происхождении эффектов малых солнечных вспышек нуждается в дополнительной проверке, поскольку не установлены с достаточной надежностью изменения температуры озонного слоя во время прекращения радиосвязи и малых солнечных вспышек.

Изложенные результаты показывают, что метеорологические факторы играют существенную роль в вариациях интенсивности жесткой компоненты космических лучей. В настоящее время мы имеем возможность со значительной точностью учитывать метеорологическую часть вариаций по данным метеорологического зондирования атмосферы. Результаты исследований приводят нас к выводу, что сезонные вариации сводятся к метеорологическим практически нацело, суточные же существенно маскируются ими и, в действительности, раза в два больше наблюдаемых.

В заключение отметим, что в этой работе мы неизменно пользовались советами С. Н. Вернова и Н. Л. Григорова. Кроме того, в производстве измерений и расчетов принимали участие гг. Г. А. Андреева, Л. Н. Беляев, Н. В. Зерова, Д. Д. Красильников, К. И. Польская, Г. В. Скрипин, В. Д. Соколов, Н. В. Тютиков и А. И. Юхманкова. Авторы выражают глубокую признательность указанным товарищам за оказанную ими широкую помощь в этой комплексной работе.

Литература

- [1] Л. Мысовский и Л. Тувим. *ZS. f. Phys.*, **50**, 273, 1928.— [2] Р. М. Blackett. *Phys. Rev.*, **54**, 973, 1938.— [3] D. W. N. Dolbear, H. Elliot. *Journ. Atm. a. Terr. Phys.*, **1**, 215, 1951.— [4] A. Duperier. *Journ. Atm. a. Terr. Phys.*, **1**, 296, 1951.— [5] S. Forbush. *Phys. Rev.*, **54**, 979, 1938; *Rev. Mod. Phys.*, **11**, 168, 1939.— [6] J. G. Wilson. *Progr. of Cosmic Rays*, Amsterdam, 1952.— [7] Е. Л. Фейнберг. *ДАН СССР*, **53**, 421, 1946.— [8] Л. И. Дорман. *ДАН СССР*, **94**, 433, 1954.— [9] Н. Л. Григоров. *ДАН СССР*, **76**, 381, 1951.— [10] С. Ф. Поуэлл. *Усп. физ. наук*, **43**, 15, 1951.— [11] *Monthly Weather Review*, **67—74**, 1939—1946.— [12] Л. И. Дорман. *ДАН СССР*, **95**, 49, 1954.— [13] К. М. Kupferberg. *Phys. Rev.*, **73**, 804, 1948.— [14] Л. И. Дорман. *ЖЭТФ*, **26**, 504, 1954.— [15] D. H. Loughridge, P. Gast. *Phys. Rev.*, **58**, 583, 1940.
-

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЯРНОМ КРИСТАЛЛЕ. II

С. В. Тябликов

Исследуется вид энергетического спектра «лишнего» электрона в полярном кристалле в предположении, что взаимодействие электрона с поляризационными колебаниями имеет адиабатический характер. Рассмотрение проводится в приближении, аналогичном методу почти свободных электронов.

1. В полярных кристаллах, как отмечалось многими авторами¹, существенную роль, в ряде случаев определяющую свойства электронов проводимости, играет взаимодействие электрона с наведенной им самим поляризацией решетки, которая сопутствует ему при движении по кристаллу. Когда эта поляризация достаточно велика, то естественно рассматривать в качестве объекта исследования электрон вместе с сопровождающей его поляризацией, который далее мы будем называть поляроном.

В настоящей заметке мы исследуем вопрос о характере энергетического спектра полярона при непосредственном учете периодического поля. В работе [4] этот вопрос рассматривался в предположении, что влияние поляризации очень велико и что эффективные размеры электронного облака в поляроне — порядка постоянной решетки. Ниже мы ставим своей целью исследование другого предельного случая, когда связь электрона с полем также имеет адиабатический характер [3], но размеры электронного облака заметно превосходят постоянную решетки. Этот случай представляет интерес еще и потому, что позволяет установить связь с результатами, полученными в приближении метода эффективной массы [1, 5, 6].

2. Гамильтониан системы запишем в виде [4]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(r) + \sum A_f e^{i(f, r)} q_f + \frac{1}{2} \sum E(f) (q_{-f} q_f + \varepsilon^4 p_{-f} p_f); \quad (1)$$

$$A_f = \frac{1}{f} \sqrt{\frac{4\pi\beta e^2 \hbar \omega}{V}}, \quad \beta = \frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa},$$

где r — координата электрона, q_f , p_f — координата и импульс f -го осциллятора поля, а $E(f)$ и $\hbar f$ — его энергия и импульс, $U(r)$ — периодический потенциал решетки, κ_0 и κ — оптическая и статическая диэлектрические постоянные, V — объем основной области периодичности, ε — малый параметр ($\varepsilon \ll 1$) [3].

Для исследования удобно в этом случае использовать адиабатическую теорию возмущений в форме, изложенной в [5, 6]. Следуя работе [6], произведем замену переменных

$$r^\alpha = q^\alpha + \lambda^\alpha, \quad q^\alpha = \varepsilon Q_1^\alpha, \quad q_f = (u_f + \varepsilon Q_f) e^{-i(f, q)} \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (2)$$

¹ Более подробную библиографию см. в [1-3].

Так как новых переменных $\{\mathbf{q}, \vec{\lambda}, Q_f\}$ на три больше, чем старых $\{\mathbf{r}, q_f\}$, то на переменные Q_f наложим три дополнительных условия:

$$\sum f^a v_f^* Q_f = 0, \quad (3)$$

и потребуем, чтобы неизвестные функции v_f , u_f удовлетворяли условиям ортогональности:

$$\sum f^a f^b v_f^* u_f = \delta_{a,b}. \quad (4)$$

После преобразования переменных (2) гамильтониан (1) может быть записан в виде:

$$H = H_0 + \varepsilon H_1 + \varepsilon^2 H_2 + \dots;$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\lambda + U(\lambda + \varepsilon Q_1) + \sum A_f e^{i(\mathbf{f}, \vec{\lambda})} u_f + \frac{1}{2} \sum E(f) |u_f|^2; \quad (5)$$

$$H_1 = \sum \{A_f e^{i(\mathbf{f}, \vec{\lambda})} + E(f) u_{-f}\} Q_f;$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum E(f) \{Q_{-f} Q_f + P'_{-f} P'_f\} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{Q_1},$$

где

$$P'_f = P_f - v_f^* \sum (\mathbf{f}, \mathbf{g}) u_g P_g, \quad P_f = -i \frac{\partial}{\partial Q_f}, \quad \mu = \frac{\hbar^2}{3} \sum f^2 \frac{|u_f|^2}{E(f)}. \quad (6)$$

При исследовании такого же типа задачи в приближении метода эффективной массы [5, 6] было показано, что величина μ , играющая роль эффективной массы полярона, может для ионных кристаллов значительно превосходить массу электрона m . Заметим далее, что в (5) переменные Q_1 и λ , описывающие соответственно трансляционное движение центра тяжести полярона (Q_1) и флуктуаций около него (λ), входят подобно тому, как в теории молекул входят координаты ядер и электронов. В последней важным моментом, существенно упрощающим решение задачи, является предположение о «медленности» движения ядер по сравнению с движением электронов [7]. Аналогично этому при определении собственных значений и собственных функций оператора (5) естественно рассматривать переменные Q_1 как «медленно меняющиеся» по сравнению с переменными λ и потому еще раз использовать адиабатическую теорию возмущений.

Для этого положим

$$Q_1^a = x Q^a; \quad x = \varepsilon \sqrt{m/\mu} \quad (x \ll 1) \quad (7)$$

и соответственно преобразуем (5)

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\lambda - x^2 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_Q + U(\lambda + xQ) + V(\lambda) + \frac{1}{2} \sum E(f) |u_f|^2,$$

$$H_1 = \sum \{A_f e^{i(\mathbf{f}, \vec{\lambda})} + E(f) u_{-f}\} Q_f, \quad H_2 = \frac{1}{2} \sum E(f) \{Q_{-f} Q_f + P'_{-f} P'_f\};$$

$$V(\lambda) = \sum A_f e^{i(\mathbf{f}, \vec{\lambda})} u_f. \quad (8)$$

Обозначим через $\varphi(\lambda, xQ)$ собственную функцию уравнения

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\lambda + U(\lambda + xQ) + V(\lambda) - W \right\} \varphi(\lambda, xQ) = 0. \quad (9)$$

Очевидно, что собственные функции φ и собственные значения W этого уравнения зависят от zQ как от параметра. И так как оператор в уравнении (9) не меняется при замене zQ на $zQ + \vec{\alpha}$, где $\vec{\alpha}$ — произвольный постоянный вектор, кратный периоду решетки, то видим, что $W(zQ)$ будет периодической функцией своего аргумента.

Будем теперь искать решение уравнения нулевого приближения, соответствующего (8):

$$(H_0 - E)\psi = 0$$

в виде:

$$\psi(\lambda, Q) = \varphi(\lambda, zQ)\chi(Q), \quad (10)$$

где φ — собственная функция уравнения (9). Замечая, что $\nabla_Q \varphi \sim O(z)$, видим, что с точностью до величин порядка z^2 включительно функция $\chi(Q)$ определяется из уравнения:

$$\left\{ -z^2 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_Q + W(zQ) - E_J \right\} \chi(Q) = 0. \quad (11)$$

Так как W — периодическая функция своего аргумента с периодом, равным периоду решетки, то спектр собственных значений уравнения (11) имеет, как известно, зонный характер. При этом, если функции χ нумеровать по квазиимпульсу полярона J , то собственные значения E_J будут периодической функцией от J . Таким образом энергия полярона будет периодической функцией квазиимпульса J , соответствующего поступательному движению как целого электрона вместе с его поляризационной ямой.

Для определения оставшихся пока неизвестными функций u_f рассмотрим уравнение первого приближения (8). Используя условие независимости собственных значений оператора от переменных поля Q_f [6], находим, что

$$u_{-f} = -\frac{A_f}{E(f)} \iint e^{i(\vec{r}, \vec{\lambda})} |\psi(\lambda, Q)|^2 d\vec{\lambda} dQ, \quad (12)$$

где ψ — собственная функция (10) уравнения нулевого приближения. Подставляя A_f и u_f (12) в $V(\lambda)$ (8), получаем следующее выражение для поляризационного потенциала

$$V(\lambda) = -\beta e^2 \int \frac{d\vec{\lambda}'}{|\vec{\lambda} - \vec{\lambda}'|} \int |\psi(\lambda', Q)|^2 dQ. \quad (13)$$

Замечая, что $\varphi(\lambda, zQ)$ при $z \ll 1$ медленно меняется с изменением Q , можем приближенно положить

$$V(\lambda) \approx -\beta e^2 \int \frac{|\varphi(\lambda', 0)|^2}{|\vec{\lambda} - \vec{\lambda}'|} d\vec{\lambda}'. \quad (14)$$

При этом уравнение (9), описывающее флуктуационное движение электрона, вызванное его взаимодействием с фононами (с поляризационными колебаниями решетки), превращается по форме в уравнение, описывающее известное движение, полученное Пекаром для полярона в периодическом поле решетки (уравнение (12.3) [1]).

Рассмотрим теперь несколько подробнее, при каких предположениях наши результаты могут соответствовать результатам расчета энергии полярона в приближении метода эффективной массы. Заметим для этого, что в рассматриваемом случае флуктуационное дрожание электрона предполагается столь большим, что электрон оказывается

размазанным по области, значительно превосходящей период решетки. В соответствии с этим можно считать, что функции φ в среднем медленно меняются на протяжении постоянной решетки. Для решения уравнения (9) мы воспользуемся вариационным методом и будем, кроме того, считать, что периодический потенциал можно рассматривать как «малое возмущение».

Возьмем за нулевое приближение решение уравнения

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\lambda + U(\lambda) + V(\lambda) - W_0 \right\} \varphi_0(\lambda) = 0 \quad (15)$$

и будем рассматривать как возмущающий потенциал величину

$$\Delta U(\lambda, xQ) = U(\lambda + xQ) - U(\lambda).$$

Используем для определения W_0 , φ_0 вариационный принцип:

$$W_0 = W_0(\varphi_0) = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \varphi_0(\lambda)|^2 d\vec{\lambda} + \int U(\lambda) |\varphi_0(\lambda)|^2 d\vec{\lambda} + \frac{1}{2} \int V(\lambda) |\varphi_0(\lambda)|^2 d\vec{\lambda} = \min.$$

Аналогично для уравнения (9) при учете (14) запишем

$$W = W(\varphi) = W_0(\varphi) + \int \Delta U |\varphi(\lambda)|^2 d\vec{\lambda} = \min.$$

Так как ΔU рассматривается как возмущение, то φ можно искать в виде: $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, где φ_1 — малая поправка порядка ΔU . Поскольку первая вариация от $W_0(\varphi)$ обращается в нуль при $\varphi = \varphi_0$ в силу выбора функций φ_0 , то видим, что с точностью до величин порядка ΔU включительно минимум выражения W равен

$$W = W_0(\varphi_0) + \int \Delta U |\varphi_0(\lambda)|^2 d\vec{\lambda}.$$

Поэтому с точностью до величин первого порядка малости относительно ΔU собственные значения уравнения (9) определяются формулой

$$W(xQ) = W_0 + \int \{U(\lambda + xQ) - U(\lambda)\} |\varphi_0(\lambda)|^2 d\vec{\lambda}. \quad (16)$$

Подставляя (16) в (11), видим, что энергия полярона определяется выражением:

$$E = W_0 + \frac{1}{2} \sum E(f) |u_f|^2 + E_J, \quad (17)$$

где W_0 и W_J — собственные значения уравнений (15) и (11), а величины u_f определяются по (12). Первые два члена в (12) дают снижение уровней энергии по сравнению с обычной блоховской зоной из-за возникновения поляризации решетки в поле электрона. Эта часть соответствует энергии так называемого «покоящегося» электрона, впервые рассчитанной Пекаром [8, 1]. Последний член E_J является периодической функцией квазиимпульса J и представляет собою расщепление основного уровня из-за трансляционного вырождения задачи. Энергия полярона в целом имеет таким образом зонный характер.

Полагая в уравнении (11) формальный параметр разложения ϵ равным единице, можем переписать уравнение в виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_q + W(q) - E_J \right) \chi = 0. \quad (18)$$

И так как $W(q)$ есть сильно сглаженный усреднением по флуктуациям периодический потенциал решетки (16), то с известной степенью точности можно рассматривать в уравнении (18) W как «возмущение» и, следовательно, применить для решения метод почти свободных электронов [9]. При этом выражение для энергии E_J будет иметь вид

$$E_J = \frac{J^2}{2\mu} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_{(b)} \frac{|W_b|^2}{\pi b^2 + (b, J)},$$

где W_b — коэффициенты Фурье функции $W(q)$, $\mathbf{b}$ — вектор обратной решетки. Для малых J энергию E_J можно разложить в ряд по степеням J : $E_J \approx J^2/2\mu^*$, где μ^* — эффективная масса полярона, заменяющая его полевою эффективную массу μ из-за влияния периодического потенциала решетки. Отношение μ^*/μ не зависит от величины μ и определяется лишь типом решетки и коэффициентами W_b ; приближенно его можно положить равным единице. Если далее уравнение (15) решать в приближении метода эффективной массы, то для эффективной массы полярона μ^* мы получаем по (6), (12) следующее выражение:

$$\mu^* \approx \mu = \frac{\hbar^2}{3} \sum f^2 \frac{|u_f|^2}{E(f)} \approx 5,2 \cdot 10^3 \left(\frac{\beta m^* e^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\beta e^2}{\omega^2}, \quad (19)$$

которое совпадает с соответствующими выражениями для μ^* , полученными в приближении метода эффективной массы [10, 5, 6]. Таким образом наш расчет дает для нижней части спектра то же выражение, что и расчет, проведенный с самого начала в приближении метода эффективной массы.

В приближении метода почти свободных электронов зоны обычно перекрываются. Поэтому возможно, что мы будем иметь фактически непрерывный спектр. Однако по своему характеру он будет зонным, что нужно иметь в виду при рассмотрении вопросов, связанных с подсчетом числа состояний.

3. Под действием различных возмущений электрон может покидать свою поляризационную яму, переходя из «поляронного» состояния в «свободное», т. е. в состояние, где ему не сопутствует поляризационная яма. Очевидно, что «свободные» состояния электрона представляют обычную зону Блоха. Энергия, необходимая для деполяризации полярона, зависит, как было показано Пекаром [1], от процесса, которым она осуществляется. В частности, отмечалось [1], что отношение энергий фото- и термодиссоциаций полярона равно 3:1. Такой же результат приведен в более поздней работе [11]. Однако можно заметить, что этот результат, хотя и верный качественно, количественно не вполне корректен из-за использования метода эффективной массы. Чтобы показать это, воспользуемся методикой работы [1] применительно к рассмотренному выше случаю.

Очевидно, что энергия термической диссоциации $E_{\text{терм}}$ равна энергии системы (17), когда электрон находится в полярном состоянии. По (15) будем иметь следующее выражение $E_{\text{терм}}$:

$$E_{\text{терм}} = E = W_0 - \frac{1}{2} \bar{V}. \quad (20)$$

Энергия оптической диссоциации $E_{\text{опт}}$ равна энергии W_0 электрона на дискретном уровне в поляризационной яме. Согласно (15) имеем

$$E_{\text{опт}} = W_0 = \bar{T} + \bar{U} + \bar{V}. \quad (21)$$

Выражение (20) для энергии системы E можно рассматривать как функционал относительно функций φ , который имеет минимум для

функций, удовлетворяющих уравнению (15). Подставим в E вместо функций $\varphi(\lambda)$ функции $\chi(\lambda)$, определенные следующим образом:

$$\chi(\lambda) = \alpha^{3/2} \varphi(\alpha\lambda); \quad \int |\chi(\lambda)|^2 d\vec{\lambda} = 1.$$

Тогда E запишется в виде: $E = \alpha^2 \bar{T} + \alpha \bar{U} + (\alpha/2) \bar{V}$, и так как E имеет экстремум при $\alpha = 1$, то отсюда получаем

$$2\bar{T} + \bar{U} + 1/2 \bar{V} = 0. \quad (22)$$

Подставляя (22) в (20) и (21), находим

$$E_{\text{терм}} = -\bar{T}; \quad E_{\text{опт}} = -3\bar{T} - \bar{U}. \quad (23)$$

Так как $\bar{U}$ и $\bar{V}$ меньше нуля, то легко видеть, что отношение энергии оптической диссоциации к энергии термической диссоциации лежит в пределах

$$1 \leq |E_{\text{опт}}/E_{\text{терм}}| \leq 3. \quad (24)$$

Это отношение равно единице, если пренебречь поляризациями ($E_{\text{опт}} \rightarrow E_{\text{терм}} \rightarrow 0$), и равно трем, если в уравнении (15) пренебречь периодическим потенциалом и перейти к приближению эффективной массы. Можно отметить, что предельный переход к исчезающе малой поляризации не имеет, вообще говоря, места, так как при этом нарушаются условия применимости адиабатического приближения.

4. Приведенные выше результаты позволяют, как нам кажется, заключить, что энергетический спектр полярона имеет зонную структуру, и в этом отношении наши результаты подобны результатам обычного рассмотрения одноэлектронной задачи (без учета поляризации). Вместе с тем характер этих зон довольно своеобразен; в таких вопросах, как поглощение света, более существенную роль играет наличие дискретного уровня у электрона в его поляризационной яме. В частности, на это указывает различие энергий для фото- и термодиссоциации полярона.

Следует заметить, что определенным недостатком приведенных результатов является использование, с одной стороны, микроскопических представлений для описания решетки и, с другой стороны, макроскопических величин для описания взаимодействия электрона с решеткой. Но, поскольку наше рассмотрение в рамках использованной модели вообще может претендовать только на качественные результаты, то это обстоятельство здесь вряд ли может иметь существенное значение.

В заключение автор пользуется случаем выразить свою признательность Н. Н. Боголюбову за обсуждение работы и ряд ценных замечаний.

Математический институт
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
8 октября 1953 г.

Литература

- [1] С. И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов, ГИТТЛ, 1951.— [2] Н. Fröhlich, H. Pelzer a. S. Zienau. Phil. Mag., 41, 221, 1950.— [3] С. В. Тябликов. ЖЭТФ, 22, 513, 1952.— [4] С. В. Тябликов. ЖЭТФ, 23, 381, 1952.— [5] Н. Н. Боголюбов. Укр. матем. журнал, 2, 3, 1950.— [6] С. В. Тябликов. ЖЭТФ, 21, 377, 1950.— [7] M. Born u. R. Oppenheimer. Ann. d. Phys., 84, 457, 1927.— [8] С. И. Пекар. ЖЭТФ, 16, 335, 1946.— [9] А. Вильсон. Квантовая теория металлов, ГИТТЛ, 1941.— [10] Л. Д. Ландау и С. И. Пекар. ЖЭТФ, 18, 419, 1948.— [11] A. Morita. Progr. of Theor. Phys., 5, 329, 1950.

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА БОЗЕ-СИСТЕМЫ ПО ЕЕ ТЕПЛОЕМКОСТИ

И. М. Лифшиц

Изучается возможность определения энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости. Дается аналитическое решение этой задачи. Показано, что формальное решение полученного интегрального уравнения является неустойчивым, однако представляющая физический интерес «сглаженная» спектральная плотность устойчива и может быть построена по экспериментальным данным, принципиально с желаемой степенью точности.

1. Постановка задачи

Как известно, при достаточно низких температурах многие макроскопические системы ведут себя в термодинамическом отношении как идеальный газ некоторых «квазичастиц» (элементарных возбуждений), подчиняющихся статистике Бозе или статистике Ферми. Энергетический спектр такой системы определяется при этом спектром квазичастиц, т. е. числом уровней квазичастиц $n(\varepsilon)d\varepsilon$ на интервал энергий $d\varepsilon$, или, что то же, законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ ($\mathbf{k}$ — волновой вектор)¹. Хорошо известными примерами систем с бозе-спектром являются фононы в кристалле и элементарные возбуждения в He II.

При построении термодинамики таких систем основная задача заключается в том, чтобы по заданному гамильтониану системы определить энергетический спектр квазичастиц, описывающих возбужденные состояния системы в целом. Если же спектральная плотность $n(\varepsilon)$ известна, то все термодинамические величины получаются при помощи квадратур. В частности, внутренняя энергия $E(\Theta)$ системы с бозе-спектром будет

$$E(\Theta) = \int_0^{\infty} \frac{n(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}{\exp(\varepsilon/\Theta) - 1}; \quad \Theta = kT, \quad (1)$$

а ее теплоемкость $C = C_v$

$$C(\Theta) = \frac{dE}{d\Theta} = \int_0^{\infty} s(\varepsilon/\Theta) n(\varepsilon) d\varepsilon, \quad s(x) = x^2/2 \operatorname{sh}^2(x/2). \quad (2)$$

Весьма большой интерес представляет, однако, изучение возможности решения обратной задачи — определения энергетического спектра системы по значениям ее термодинамических характеристик. Как

¹ Спектральная плотность $n(\varepsilon)$ связана с $\varepsilon(\mathbf{k})$ очевидным соотношением

$$n(\varepsilon) = V/(2\pi)^3 \int \delta[\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})] dk_x dk_y dk_z,$$

где V — объем системы. Для изотропной системы мы имеем

$$n(\varepsilon) d\varepsilon = (V/2\pi^2) k^2 dk.$$

видно из формул (1) и (2), величиной, подлежащей непосредственному определению при решении обратной задачи, является спектральная плотность $n(\varepsilon)$. В настоящей заметке спектральная плотность $n(\varepsilon)$ определяется по значениям теплоемкости $C(\Theta)$ для системы, обладающей бозе-спектром. Подобная задача, повидимому, не имеет смысла для системы с ферми-спектром, так как для всех известных случаев таких систем неидеальность газа квазичастиц становится существенной раньше, чем начинает проявляться закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$.

2. Решение интегрального уравнения

Согласно (2) мы можем написать

$$\frac{C(\Theta)}{\Theta} = \int_0^{\infty} s\left(\frac{\varepsilon}{\Theta}\right) \frac{\varepsilon}{\Theta} n(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}. \quad (3)$$

Как всегда, величина $C(\Theta)/\Theta$ предполагается квадратично интегрируемой. Формальное решение уравнения (3) можно получить, используя преобразование Меллина. Однако, для того чтобы сделать последующий анализ более наглядным, удобно предварительно привести это уравнение при помощи подстановки

$$\varepsilon = e^{\xi}, \quad \Theta = e^{\tau} \quad (4)$$

к форме

$$\int_{-\infty}^{\infty} k(\tau - \xi) \varphi(\xi) d\xi = \alpha(\tau); \quad (5)$$

$$\alpha(\tau) = e^{-\tau} C(e^{\tau}), \quad \varphi(\tau) = n(e^{\tau}); \quad (6)$$

$$k(\tau) = e^{-3\tau} / 4 \operatorname{sh}^2\left(\frac{e^{-\tau}}{2}\right).$$

Полученное интегральное уравнение имеет разностное ядро и формально легко решается при помощи преобразования Фурье. Умножая обе части (5) на $e^{ip\tau}$ и интегрируя от $-\infty$ до ∞ , мы получим после элементарных преобразований

$$\sqrt{2\pi} K(p) \Phi(p) = A(p); \quad (7)$$

$$K(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k(\tau) e^{ip\tau} d\tau = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Gamma(3 - ip) \zeta(2 - ip); \quad (8)$$

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\tau) e^{ip\tau} d\tau; \quad A(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(\tau) e^{ip\tau} d\tau;$$

$\zeta(z)$ — ζ -функция Римана. Отсюда получаем

$$\Phi(p) = A(p) / K(p) \sqrt{2\pi}. \quad (9)$$

Возвращаясь к функции $\varphi(\xi)$, имеем

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(p)}{K(p)} e^{-ip\xi} dp; \quad (10)$$

и для спектральной плотности $n(\varepsilon)$ [$n(\varepsilon) = \varphi(\ln \varepsilon)$]

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{V 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(p) \varepsilon^{-ip} dp}{\Gamma(3-ip) \zeta(2-ip)}. \quad (11)$$

3. Введение «сглаженной» спектральной плотности

Исследование полученного решения показывает его неустойчивость: функция $1/K(p)$ при больших p возрастает как $e^{\pi|p|/2}$. Это означает, что для существования решения нужно, чтобы $A(p)$ достаточно быстро убывала при $|p| \rightarrow \infty$, т. е. чтобы функция $\alpha(\tau)$ была аналитической. Поэтому сколь угодно малая, но недостаточно гладкая добавка к правой части уравнения (3) совершенно меняет поведение $\Phi(p) = A(p)/K(p)V 2\pi$ в области больших p и, следовательно, может привести даже к исчезновению решения².

Неустойчивость, о которой идет речь, связана с поведением $\Phi(p)$ в области больших p и имеет простой физический смысл: замена гладкой функции $\varphi(\tau)$ достаточно быстро осциллирующей функцией $\varphi^*(\tau)$, совпадающей с $\varphi(\tau)$ «в среднем» на каждом достаточно малом участке, практически не меняет результата интегрирования в (5) [т. е. правой части $\alpha(\tau)$ в этом уравнении]. Так как за быстрые осцилляции $\varphi(\tau)$ ответственны большие $|p|$, а интерес представляет лишь «сглаженная» спектральная плотность, то упомянутая выше неустойчивость может быть устранена за счет «сглаживания» $\varphi(\tau)$ при помощи надлежаще выбранного ядра, что отвечает умножению ее амплитуд Фурье $\Phi(p)$ на быстро убывающую функцию $\psi_{p_0}(p)$, т. е. замене $\Phi(p)$ на $\Phi_{p_0}(p)$:

$$\Phi_{p_0}(p) = \Phi(p) \psi_{p_0}(p). \quad (12)$$

Так, например, выбирая $\psi_{p_0}(p) = \exp[-p^2/4p_0^2]$, мы заменяем $\varphi(\tau)$ «сглаженной» функцией $\varphi_{p_0}(\tau)$

$$\varphi_{p_0}(\tau) = \frac{p_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\tau') \exp[-p_0^2(\tau - \tau')^2] d\tau'. \quad (13)$$

Соответственно искомая спектральная плотность $n(\varepsilon)$ заменяется сглаженной плотностью $n_{p_0}(\varepsilon) = \varphi_{p_0}(\ln \varepsilon)$

$$n_{p_0}(\varepsilon) = \frac{p_0}{2\pi} \int_0^{\infty} n(\varepsilon') \exp\left[-p_0^2 \ln^2 \frac{\varepsilon'}{\varepsilon}\right] \frac{d\varepsilon'}{\varepsilon'}.$$

При достаточно больших p_0 , очевидно,

$$n_{p_0}(\varepsilon) \approx \frac{p_0}{2\pi} \int_0^{\infty} n(\varepsilon') \exp\left[-p_0^2 \left(\frac{\varepsilon' - \varepsilon}{\varepsilon}\right)^2\right] d\frac{\varepsilon' - \varepsilon}{\varepsilon},$$

т. е. ширина интервала сглаживания $\Delta\varepsilon$ будет $\Delta\varepsilon/\varepsilon = \Delta\tau \sim 1/p_0$.

Записывая согласно (9) и (12) $\Phi_{p_0}(p)$ в виде

$$\Phi_{p_0}(p) = \sqrt{2\pi} A(p) [\psi_{p_0}(p)/2\pi K(p)],$$

² Факт неустойчивости виден, впрочем, сразу и из общих соображений: интегральный оператор в (5) вполне непрерывный; поэтому обратный ему оператор — неограниченный.

мы введем «сглаженное» ядро резольвенты

$$q_{p_0}(\tau) = \frac{1}{V^{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi_{p_0}(p)}{K(p) 2\pi} e^{-i p \tau} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[-p^2/4p_0^2]}{\Gamma(3-ip)\zeta(2-ip)} e^{-i p \tau} dp. \quad (14)$$

Пользуясь теоремой о свертке, мы получим согласно (13) и (14)

$$\varphi_{p_0}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} q_{p_0}(\xi - \tau) \alpha(\tau) d\tau \quad (15)$$

или, возвращаясь к первоначальным переменными Θ и ε ,

$$n_{p_0}(\varepsilon) = \int_0^{\infty} R_{p_0}\left(\frac{\varepsilon}{\Theta}\right) \frac{C(\Theta)}{\Theta} \frac{d\Theta}{\Theta}, \quad (16)$$

$$R_{p_0}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[-p^2/4p_0^2]}{\Gamma(3-ip)\zeta(2-ip)} x^{-ip} dp. \quad (17)$$

Формулы (16) и (17) дают полное решение поставленной задачи.

Если существует точное (не «сглаженное») решение уравнения (3), то оно дается пределом

$$n(\varepsilon) = \lim_{p_0 \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} R_{p_0}\left(\frac{\varepsilon}{\Theta}\right) \frac{C(\Theta)}{\Theta} \frac{d\Theta}{\Theta}. \quad (18)$$

4. Исследование устойчивости «сглаженного» решения

Ядро $q_{p_0}(\xi) = R_{p_0}(e^{\xi})$, как следует из (14), является осциллирующей и быстро убывающей по модулю функцией аргумента ξ (на вещественной оси). Порядок убывания $q_{p_0}(\xi)$ на вещественной оси при $|\xi| \rightarrow \infty$ на основании гипотезы о расположении нулей ζ -функции оказывается равным³

$$q_{p_0}(\xi) \sim e^{-3/2|\xi|}.$$

По этой причине задание теплоемкости во всей области температур (в частности, в областях $\Theta/\varepsilon \ll 1$ и $\Theta/\varepsilon \gg 1$) не является необходимым для решения задачи. Амплитудная величина осцилляций $q_{p_0}(\xi)$ при больших p_0 определяется множителем $\exp \pi p_0$.

Норма интегрального оператора резольвенты в (15), как следует из (14), удовлетворяет неравенству

$$\begin{aligned} \|q_{p_0}(\xi)\| &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} |q_{p_0}(\xi)|^2 d\xi \right]^{1/2} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[-p^2/2p_0^2] dp}{|\Gamma^2(3-ip)\zeta^2(2-ip)|} \right]^{1/2} < M \exp[\pi^2 p_0^2/4] \end{aligned} \quad (19)$$

(M — численная константа порядка единицы). Поэтому, если правая часть в уравнении (5) определена с точностью до $\Delta\alpha(\tau)$, то искомая

³ Нули функции $\Gamma(3-ip)\zeta(2-ip)$ расположены на прямой $p = s - 3/2 i$ (s — вещественно). Смещая контур интегрирования до этой прямой, получаем указанный результат.

функция $\varphi_{p_0}(\tau)$ определена с точностью до $\Delta\varphi_{p_0}(\tau)$, причем

$$\|\Delta\varphi_{p_0}(\tau)\| < M \exp\left[\frac{\pi^2 p_0^2}{4}\right] \|\Delta\alpha(\tau)\| \quad (20)$$

[$\|f\|$ означает норму f , т. е. $(\int |f|^2 d\tau)^{1/2}$].

Если выбрать в качестве сглаживающей функции ядро Дирихле [$\psi_{p_0}(p) = 1$ при $|p| < p_0$ и $\psi_{p_0}(p) = 0$ при $|p| > p_0$] или ядро Фейера [$\psi_{p_0}(p) = 1 - \frac{|p|}{p_0}$ при $|p| < p_0$ и $\psi_{p_0}(p) = 0$ при $|p| > p_0$], то для нормы оператора резольвенты имеем

$$\|q_{p_0}(\xi)\| < M_1 \exp[\pi p_0/2]. \quad (21)$$

При этом приведенную оценку (20) можно снизить за счет экспоненциального фактора

$$\|\Delta\varphi_{p_0}(\tau)\| < M_1 \exp[\pi p_0/2] \|\Delta\alpha(\tau)\|. \quad (22)$$

Аналогичную оценку можно получить не только для нормы $\|\Delta\varphi\|$, но и для локальных значений $\Delta\varphi(\tau)$, т. е. для ширины полосы, в которой расположена искомая спектральная плотность. Используя неравенство Буняковского, из (15) имеем

$$\Delta\varphi_{p_0}(\tau) < \|q_{p_0}(\tau)\| \|\Delta\alpha(\tau)\|. \quad (23)$$

5. О точности построения сглаженной спектральной плотности по экспериментальным значениям теплоемкости

Типичной постановкой вопроса является следующая: экспериментальные значения теплоемкости заданы в точках Θ_n с относительной неточностью δ_n , т. е. $C_{\text{эксп}}(\Theta_n) = C(\Theta_n)(1 + \delta_n)$. Требуется определить среднее квадратичное отклонение спектральной плотности $n(\varepsilon)$, построенной по этим значениям, от ее истинной величины.

Если $\Delta\tau_n = \Delta\Theta_n/\Theta_n \ll 1/p_0$, то формула (15) дает

$$\delta\varphi_{p_0} = \sum_n q_{p_0}(\xi - \tau_n) \alpha(\tau_n) \Delta\tau_n \delta_n. \quad (24)$$

Считая погрешности δ_n случайными величинами, для среднего квадратичного отклонения получаем

$$\begin{aligned} \overline{(\delta\varphi_{p_0})^2} &= \sum_n q_{p_0}^2(\xi - \tau_n) \alpha^2(\tau_n) (\Delta\tau_n)^2 \overline{\delta_n^2} = \\ &= \overline{\delta^2} \Delta\tau \int q_{p_0}^2(\xi - \tau) \alpha^2(\tau) d\tau < \overline{\delta^2} \Delta\tau \|q\|^2 \|\alpha\|^2, \end{aligned} \quad (25)$$

где положено $\Delta\tau_n = \Delta\tau$, $\overline{\delta_n^2} = \overline{\delta^2}$.

Таким образом, располагая экспериментальные точки достаточно густо, т. е. выбирая достаточно малый шаг $\Delta\tau$ и отвлекаясь от систематических ошибок, можно при достаточной точности измерений принципиально определить сглаженную плотность с желаемой степенью точности. Однако, как видно из формул (20), (22) и (25), требуемая точность измерений оказывается весьма большой.

Так, например, выбирая относительную ширину интервала сглаживания $\Delta\varepsilon/\varepsilon \sim 1/4$ (т. е. $p_0 = 4$), относительную погрешность $\delta \sim 10^{-3}$ и относительный шаг $\Delta\tau \sim 10^{-2}$, мы получим, учитывая, что $\|\alpha\| \sim \|\varphi\|$,

$$\overline{(\delta\varphi_{p_0})^2} / \|\varphi_{p_0}\|^2 \sim 10^{-2}.$$

Неутешительность полученного результата облегчается часто тем обстоятельством, что наличие убедительных теоретических соображений позволяет заранее сделать заключение о характере энергетического спектра и лишь проверять его по измерениям теплоемкости.

Так, например, при малых энергиях из разложения $\epsilon = \epsilon(k)$ по степеням k вытекает степенной закон для спектральной плотности $n(\epsilon)$ [при $\epsilon \sim k$, $n(\epsilon) \sim \epsilon^2$], а отсюда и степенной закон для теплоемкости в области достаточно низких температур. В этом случае задача сравнения с экспериментом сводится лишь к определению показателя степени и коэффициента в законе $C = A\theta^n$, что может быть сделано с большой точностью.

Напротив, в области более высоких температур (например, для кристаллов при температурах, сравнимых с дебаевской), где общие теоретические соображения не предоставляют возможности указать заранее класс допустимых функций для $n(\epsilon)$, приведенные оценки точности определения $n(\epsilon)$ по экспериментальным данным дают истинные границы этой точности.

В заключение следует указать, что приведенные соображения и метод сглаженных решений имеют применение и в других областях физики, связанных с решением обратных задач. В частности, к такой же постановке приводит и задача об определении потенциала по значениям фазы на бесконечности в задаче о рассеянии частиц.

Пользуюсь случаем выразить благодарность Л. Д. Ландау, В. А. Марченко и М. Г. Крейну за ценные дискуссии.

Физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
2 ноября 1953 г.

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ТЕОРИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ АНИЗОТРОПНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Н. В. Мицкевич

Исследовано уравнение теплопроводности, записанное в тензорном виде для случая анизотропного твердого тела. Особенно типично решение, полученное для неограниченного тела. Выведены формулы применения функции Грина для нахождения решения в анизотропном случае.

1. Постановка общей задачи. Краевые условия

Уравнение теплопроводности для анизотропного однородного тела может быть написано, если исходить, как обычно, из теплового баланса. Основное отличие от методов вывода уравнения для изотропного тела состоит во введении тензора теплопроводности k_{ij} [1], который связывает поток тепла q_i с градиентом температуры $u = u(x_1, x_2, x_3, t)$:

$$-q_i = k_{ij} \partial u / \partial x_j. \quad (1)$$

Здесь и далее по встречающимся двукратно значкам проводится суммирование от 1 до 3.

Уравнение теплопроводности запишется в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + F(x_1, x_2, x_3, t), \quad (2)$$

где $a_{ij} = k_{ij} / c\rho$ — тензор температуропроводности (c — теплоемкость, ρ — плотность тела), а F — функция, характеризующая плотность источников в данной точке рассматриваемого тела. Аналогичное однородное уравнение (выписанное в виде суммы) было получено Стоксом [2] из соображений предположительного характера.

Основные краевые условия запишутся следующим образом: на поверхности задана температура

$$u|_{\Sigma} = \varphi; \quad (3)$$

на поверхности задан тепловой поток

$$N_i a_{ih} \frac{\partial u}{\partial x_h} \Big|_{\Sigma} = \psi; \quad (4)$$

на поверхности происходит теплообмен с окружающей средой по закону Ньютона

$$N_i a_{ih} \frac{\partial u}{\partial x_h} \Big|_{\Sigma} = -h(u|_{\Sigma} - \theta), \quad (5)$$

где φ, ψ, θ — заданные функции времени и точки поверхности тела, N_i — вектор внешней нормали в этой точке, h — коэффициент закона Ньютона.

2. Некоторые решения задачи теплопроводности для анизотропных тел конкретной формы

Так как решение одномерной задачи не дает ничего нового для выяснения специфики, вносимой анизотропией, обратимся сразу к трехмерному случаю. Задан прямоугольный параллелепипед, ребра которого направлены по координатным осям, с нулевой температурой на поверхности; начальная температура дана в виде функции $f(x_1, x_2, x_3)$, источники отсутствуют. Решение может быть получено методом разделения переменных. Нетрудно видеть, что в этом случае

$$u = \sum_{l_1, l_2, l_3=1}^{\infty} C_{l_1, l_2, l_3} \sin x_1 n_1 \sin x_2 n_2 \sin x_3 n_3 \exp \{-a_{lh} n_l n_h t\}, \quad (6)$$

где $n_i = \pi l_i / L_i$, l_i — целые числа, L_i — длины соответствующих ребер параллелепипеда; C_{l_1, l_2, l_3} определяются из начальных условий при помощи формул, совершенно идентичных с выражениями для случая изотропного тела [3], так как, очевидно, в момент $t = 0$ анизотропные свойства не сказываются на функции $u(x_1, x_2, x_3, 0)$. По этой причине мы не приводим соответствующей формулы.

Частное решение однородного уравнения теплопроводности (2) может быть получено интегрированием по параметрам n_1, n_2, n_3 в бесконечных пределах другого частного решения,

$$u = \exp \{i x_h n_h - a_{lh} n_l n_h t\}, \quad (7)$$

которое можно интерпретировать, как решение для параллелепипеда с ребрами L_1, L_2, L_3 при соответствующих граничных и начальных условиях (аналогичный пример для аморфного тела дан в [4]). Вычисления¹ оказываются более громоздкими, чем в изотропном случае, но в конечном итоге приводят к следующему весьма простому и своеобразному результату:

$$u = \sqrt{\pi^3 / at^3} \exp \{-x_i x_h b_{ih} / 4t\}, \quad (8)$$

где b_{ih} — тензор, обратный a_{ih} ; величина a — детерминант, составленный из компонент тензора a_{ih} .

Решением для неограниченного твердого анизотропного тела при произвольных начальных условиях, задаваемых функцией $f(x_1, x_2, x_3)$ (если, конечно, эта функция удовлетворяет требованию непрерывности, как в аналогичном случае для изотропного тела), будет

$$u = \frac{1}{8V a \pi^3 t^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x'_1, x'_2, x'_3) \exp \{-(x_i - x'_i)(x_h - x'_h) b_{ih} / 4t\} (dx'), \quad (9)$$

так как можно показать, что u переходит в $f(x_1, x_2, x_3)$ при стремлении t к нулю.

Пользуясь обычными приемами, можно получить отсюда решение задачи, например, для полуограниченного анизотропного тела с нулевой температурой на границе:

$$u = \frac{1}{8V a \pi^3 t^3} \int_0^{\infty} dx'_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x'_1, x'_2, x'_3) [\Phi(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) - \Phi(x_1 + x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3)] dx'_2, dx'_3, \quad (10)$$

¹ См. Приложение.

где

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = \exp\{-x_i x_k b_{ik} / 4t\}.$$

Указанные решения удовлетворяют принципу соответствия, переходя в решения для изотропного тела при подстановке вместо a_{ik} величин $a_0 \delta_{ik}$, имеющих место в изотропном случае.

В связи с изложенным напрашивается вывод, что по крайней мере в ряде случаев переход от изотропной задачи к анизотропной может быть совершен путем замены $a_0 \delta_{ik}$ на a_{ik} и δ_{ik} / a_0 на b_{ik} [см., например, (2) и (9)].

3. Применение функции Грина для решения задачи теплопроводности в случае анизотропного тела

Воспользуемся очевидным обобщением формулы Гаусса — Остроградского

$$\iiint_V a_{ik} \frac{\partial P_i}{\partial x_k} (d\mathbf{x}) = \iint_S a_{ik} P_i N_k d\sigma, \quad (11)$$

где P_i есть произвольный вектор, который вместе со своими первыми производными непрерывно зависит от x_1, x_2, x_3 в области V , включая кусочно-гладкую границу S -области. Тогда легко получить выражение для решения задачи теплопроводности в анизотропном теле при краевом условии (3) в виде:

$$u = \iiint_V G_{\tau=0} f(x'_1, x'_2, x'_3) (d\mathbf{x}') - \int_0^t d\tau \iint_S \varphi(x'_1, x'_2, x'_3, \tau) \frac{\partial G}{\partial x_i} N_k a_{ik} d\sigma', \quad (12)$$

где $G = G(x_1, x_2, x_3; x'_1, x'_2, x'_3; t, \tau)$ — функция Грина анизотропной задачи.

Для других краевых условий записи решений аналогичны: для краевого условия (4)

$$u = \iiint_V G f(d\mathbf{x}') + \int_0^t d\tau \iint_S G \psi d\sigma'; \quad (13)$$

для краевого условия (5)

$$\begin{aligned} u &= \iiint_V G f(d\mathbf{x}') + h \int_0^t d\tau \iint_S G \theta d\sigma' = \\ &= \iiint_V G f(d\mathbf{x}') - \int_0^t d\tau \iint_S a_{ik} \frac{\partial G}{\partial x_i} N_k \theta d\sigma'. \end{aligned} \quad (14)$$

Для полуограниченного анизотропного твердого тела, например в случае краевого условия (3), функция Грина в обозначениях предыдущего параграфа запишется как

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{8V a \pi^3 (t-\tau)^3} [\Phi(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3, t - \tau) - \\ &\quad - \Phi(x_1 + x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3, t - \tau)]. \end{aligned} \quad (15)$$

4. Приведение задачи теплопроводности в анизотропном теле к задаче для изотропного тела в косоугольной системе координат

Если перейти к косоугольной системе координат (такой, чтобы оси совпадали с главными направлениями теплопроводности), то уравнение (2) примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + a_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + a_3 \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} + F(x_1, x_2, x_3, t), \quad (16)$$

где a_1, a_2, a_3 — главные коэффициенты температуропроводности. Дальнейшее упрощение приводит к

$$\partial u / \partial t = \nabla'^2 u + F(x'_1, x'_2, x'_3, t), \quad (17)$$

если перейти к «анизотропному» масштабу

$$x'_1 = x_1 / \sqrt{a_1}, \quad x'_2 = x_2 / \sqrt{a_2}, \quad x'_3 = x_3 / \sqrt{a_3}; \quad (18)$$

лапласиан ∇'^2 берется по штрихованным координатам. Следует заметить, что уравнения, весьма похожие на (16) и (17), были получены, соответственно, в работах [5] и [2].

Таким образом задача свелась к решению уравнения теплопроводности для изотропного тела с единичным коэффициентом температуропроводности. При этом, конечно, необходимо учитывать изменения условий задачи и после применения обычной теории совершать переход к исходной координатной системе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Интеграл

$$u = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \{ i x_h n_h - a_{ih} n_i n_h t \} dn_1 dn_2 dn_3 \quad (A)$$

при помощи обычных приемов замены переменных приводится к произведению трех интегралов вида

$$I(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\eta\zeta - \zeta^2} d\zeta \quad (B)$$

с некоторым зависящим от t и компонент тензора a_{ih} коэффициентом; здесь η и ζ обозначают новые переменные, введенные при замене (они различны для указанных трех интегралов).

Интеграл (B) берется следующим образом. Дифференцированием и интегрированием по частям получим

$$\frac{d}{d\eta} I(\eta) = -\frac{\eta}{2} I(\eta);$$

решая это дифференциальное уравнение и принимая во внимание, что

$$I(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} d\zeta = \sqrt{\pi},$$

находим

$$I(\eta) = \sqrt{\pi} e^{-\eta^2/4}$$

(см. [4]).

Подставляя вместо η его выражение через x, y, z, t, a_{ih} , получаем для (A)

$$u = \sqrt{\pi^3 / at^3} e^{-b/4at}, \quad (C)$$

где

$$a = a_{11}a_{22}a_{33} + 2a_{12}a_{23}a_{31} - a_{11}a_{23}^2 - a_{22}a_{31}^2 - a_{33}a_{12}^2$$

и

$$b = x^2(a_{22}a_{33} - a_{23}^2) + y^2(a_{11}a_{33} - a_{13}^2) + z^2(a_{11}a_{22} - a_{12}^2) + \\ + 2xy(a_{13}a_{23} - a_{12}a_{33}) + 2yz(a_{12}a_{13} - a_{11}a_{23}) + 2zx(a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22}).$$

Как известно, тензор, обратный a_{ih} , определяется как

$$b_{ih} = \frac{A_{ih}}{|a_{ih}|},$$

где A_{ih} — алгебраические дополнения соответствующих элементов a_{ih} детерминанта, составленного из компонент тензора температуропроводности.

Принимая во внимание, что a является детерминантом $|a_{ih}|$ тензора температуропроводности, в то время как в b коэффициентами при квадратичных произведениях координат являются соответствующие алгебраические дополнения, мы можем записать результат интегрирования (C) в виде (8).

Проверить, что это выражение действительно является частным решением уравнения теплопроводности, можно непосредственной подстановкой его в (2) (при условии, что $F \equiv 0$); при этом следует учесть, что

$$a_{ih}b_{hj} = \delta_{ij}.$$

Получение из (8) общего решения задачи для неограниченного тела и доказательство того, что оно удовлетворяет начальным условиям, ничем не отличаются от аналогичных расчетов в обычной теории теплопроводности изотропных твердых тел.

В заключение считаю своим приятным долгом выразить глубокую благодарность В. Р. Регелю за указание темы и обсуждение.

Институт кристаллографии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
29 октября 1953 г.

Литература

- [1] А. В. Шубников, Е. Е. Флинт и Г. Б. Бокый. Основы кристаллографии, М., 1940. — [2] G. G. Stokes. Cambr. a. Dublin Math. Journ., 6, 215, 1851. — [3] Х. С. Карслоу. Теория теплопроводности, ГТТИ, М.—Л., 1947. — [4] Р. Курант и Д. Гильберт. Методы математической физики, т. 2, ГТТИ, стр. 26, 1951. — [5] J. M. C. Duhamel. Journ. de l'école polytechn., 19, 155, 1848.

К ТЕОРИИ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ. I

Г. М. Авакьянц

Рассмотрен перенос тепла и электричества в полупроводниках в условиях, когда электронный (дырочный) газ полупроводника сильно разогревается в электрическом поле, связанном с прохождением тока через полупроводник. Выведены уравнения для потоков тепла и электричества в форме, позволяющей учесть разогревание электронов (дырок) во внешнем электрическом поле. На основе указанных уравнений получены общие формулы для термоэлектрических и гальваномагнитных эффектов.

1. Введение

Широкое использование полупроводников в науке и технике (твердые выпрямители, фотоэлементы и фотосопротивления, полупроводниковые триоды) ставит задачу об их дальнейшем исследовании и, в особенности, в условиях, близких к условиям, встречающимся при использовании их на практике. В частности, важно знать свойства полупроводника, когда через него проходят большие токи или в том случае, когда внутри полупроводника возникают значительные напряженности электрического поля. Свойства полупроводника (как то: электропроводность, концентрация носителей заряда, поляриность носителей заряда, работа выхода и др.) в этом случае могут оказаться совершенно не похожими на его свойства при прохождении через него слабых токов или при исследовании полупроводника в слабых полях.

При наличии внутри проводника сильного электрического поля, средняя кинетическая энергия носителей зарядов достигает больших значений, причем она может на много (на несколько порядков) превосходить среднюю тепловую энергию движения в отсутствие поля внутри полупроводника или в случае, когда это поле достаточно мало. Увеличение средней кинетической энергии носителей заряда (электронов или дырок) в сильном электрическом поле мы, ради краткости, будем называть «разогреванием» электронного (дырочного) газа. Как показывает расчет [1], значительное разогревание электронного газа будет иметь место в случае, если напряженность электрического поля E удовлетворяет следующему неравенству:

$$\frac{1}{6} \frac{(eEl)^2}{m\omega^2 kT} \gg 1. \quad (1.1)$$

Здесь l — длина свободного пробега электронов (дырок), ω — скорость звука, остальные обозначения обычные¹. Принимается обычно, что длина свободного пробега носителей заряда в атомных полупро-

¹ Если рассеяние электронов происходит не на волнах решетки, а на отдельных атомах или ионах с эффективной массой M , то ω^2 следует заменить на kT/M .

водниках колеблется между $10^{-5} - 10^{-6}$ см. В таком случае из (1.1) нетрудно найти, что неравенство имеет место при напряженности поля в несколько сот V/cm . Такие поля внутри слоя полупроводника возникают при работе обычных твердых выпрямителей. В самом деле, на выпрямителе падает напряжение приблизительно в 1 V при толщине слоя полупроводника порядка нескольких микронов. Отсюда следует, что напряженность поля будет иметь величину около тысячи V/cm . Таким образом есть основание считать, что современные твердые выпрямители работают в условиях, когда электронный газ внутри слоя полупроводника заметно разогрет.

Значит, чтобы лучше разобраться в работе твердых выпрямителей, следует свойства полупроводника изучать в условиях, при которых внутри слоя полупроводника имеется поле, удовлетворяющее, в частности, неравенству (1.1).

Целью настоящей работы является теоретическое исследование явлений переноса тепла и электричества в полупроводниках в условиях, когда имеется значительное разогревание электронного (дырочного) газа в них. Как известно, изучение гальваномагнитных и термоэлектрических эффектов позволяет установить целый ряд важнейших параметров полупроводника: знак носителей заряда, их эффективную массу и концентрацию и т. д. Однако определение этих параметров связано с использованием теоретических формул. Теоретические же формулы (встречающиеся в литературе), определяющие величину перечисленных выше эффектов, выведены без учета разогревания электронного газа.

Теоретическому исследованию эффектов, связанных с переносом тепла и электричества в полупроводниках, посвящен ряд работ, среди которых отметим работы Шифрина [2], Ансельма и Клячкина [3], Райта [4], Толпыго [5] и Писаренко [6]. Наиболее полной является работа Толпыго.

В своей работе Толпыго рассмотрел все наиболее известные эффекты как в предположении максвелловского распределения электронов по скоростям, когда сферически симметричная часть функции распределения имеет вид

$$f_0 = A \exp \{-m'v^2/2kT\}, \quad (1.2)$$

так и в случае, когда функция распределения f_0 представлена выражением

$$f_0 = B \exp \{-\mathcal{E}/kT\}, \quad (1.3)$$

где $\mathcal{E}$ — кинетическая энергия носителей заряда, причем зависимость $\mathcal{E}$ от скорости v предполагается любой; m' — эффективная масса.

Следует указать, что в работе [5] в некоторых окончательных формулах [(15), (30), (21), (27), (34)] имеются описки. Все окончательные формулы в работе [5], относящиеся к максвелловскому распределению, могут быть получены путем предельного перехода из наших более общих формул, что мы и сделаем ниже с тем, чтобы читатель мог найти здесь формулы, относящиеся к максвелловскому распределению, уже в корректном виде.

В случае сильных электрических полей сферически симметричная часть функции распределения не имеет вида ни формулы (1.2), ни формулы (1.3).

В связи с этим вывод формул для термоэлектрических, гальваномагнитных и других эффектов следует произвести, не используя конкретного вида моментов функции f_0 .

2. Вывод уравнений для потоков тепла и электричества

При выводе уравнений переноса мы сделаем наше основное предположение, а именно, будем считать, что энергия электрона (дырки) квадратично зависит от его импульса. Такую зависимость следует ожидать в атомных полупроводниках, у которых, выражаясь терминами зонной теории, ширина зоны проводимости в несколько раз больше средней кинетической энергии электронов. Для электронных полупроводников это условие, повидимому, всегда может считаться выполненным (или приблизительно выполненным), так как здесь зона проводимости, которая может быть образована в некоторых случаях перекрытием нескольких зон, непосредственно примыкает к непрерывному спектру энергий электрона в вакууме. В случае дырочных атомных полупроводников необходимо, чтобы ширина заполненной зоны была порядка, по крайней мере, нескольких вольт, если мы допускаем увеличение средней кинетической энергии дырки до одного вольта. Впрочем, как мы увидим ниже, все эффекты, связанные с разогреванием электронного (дырочного) газа, начинают сказываться и при меньшей средней энергии электронов, особенно при низких температурах.

Наше основное предположение вытекает из необходимости задать какую-либо, но вполне определенную связь между энергией и импульсом частицы, в противном случае отыскание функции f в случае сильных полей становится невозможным. В качестве простейшей связи между $\mathcal{E}$ и p мы примем соотношение

$$\mathcal{E} = p^2 / 2m'. \quad (2.1)$$

Ограничимся случаем атомного полупроводника. Если $f(p)$ — функция распределения подвижных носителей заряда по импульсам (ради краткости будем в последующем вместо «подвижные носители заряда» говорить «электроны»), то ее всегда можно записать в следующем виде:

$$f(p) = f_0(p) + f_1(p) \cos \alpha + \chi(p), \quad (2.2)$$

где α — угол между направлением тока и направлением импульса электрона: $\alpha = \arccos(p\mathbf{f}_1 / pf_1)$. Как показано Давыдовым [1], в большинстве случаев последний член в (2.2) значительно меньше первых двух. Для функций же f_0 и f_1 при наличии произвольных электрических и магнитных полей имеют место следующие уравнения:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + p(n'f_0 - n'_0f^0) + \frac{v}{3} \operatorname{div} \mathbf{f}_1 + \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 j_p) = 0, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial t} + v \nabla f_0 + e \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial p} + [\vec{\Omega}, \mathbf{f}_1] + \frac{v}{l} \mathbf{f}_1 = 0, \quad (2.4)$$

где j_p — поток электронов в импульсном пространстве:

$$j_p = - \left(m' \omega^2 \frac{p}{l} \frac{\partial f_0}{\partial p} + \frac{p^2 \omega^2}{lkT} f_0 \right) + \frac{e}{3} (E \mathbf{f}_1). \quad (2.5)$$

Здесь f^0 — максвелловская функция распределения, n' — число свободных мест (локальных «дырок») на донорных уровнях (ради краткости ограничиваемся случаем электронного полупроводника), n'_0 — равновесное число свободных мест на донорных уровнях. Максвелловская функция f^0 имеет следующий вид:

$$f^0 = (2\pi m' kT)^{-3/2} N_0 \exp(-p^2 / 2m' kT), \quad (2.6)$$

где N_0 — равновесное число электронов в зоне проводимости. В том случае, когда концентрация свободных электронов значительно меньше концентрации донорных атомов примеси, $n' = n_0^2 / N$, где N — концентрация электронов в данной точке. Далее, $\Omega = eB / m'c$, где B — напряженность магнитного поля, c — скорость света, ρ — коэффициент рекомбинации электрона с локальной дыркой, являющийся, вообще говоря, функцией p . В дальнейшем мы будем интересоваться лишь стационарным случаем ($\partial f_0 / \partial t = \partial f_1 / \partial t = 0$). Считая также, что $f_0 \gg f_1$, мы будем иметь

$$N = 4\pi \int_0^\infty f_0 p^2 dp. \quad (2.7)$$

Используя далее неравенство $f_1 \gg \chi$, получаем для потоков тепла Q_e и электричества j следующие формулы:

$$Q_e = \frac{2\pi}{3m'^2} \int_0^\infty f_1 p^5 dp, \quad (2.8)$$

$$j = \frac{4\pi}{3m'} e \int_0^\infty f_1 p^3 dp. \quad (2.9)$$

Представим f_0 в виде:

$$f_0 = N(r) F(r, p), \quad (2.10)$$

так что

$$4\pi \int_0^\infty F(r, p) p^2 dp = 1. \quad (2.11)$$

Из уравнений (2.3) и (2.4) для стационарного случая находим, что

$$f_1 = \frac{-(l/v) R + (l^2/v^2) [R\vec{\Omega}] + (l^3/v^3) \vec{\Omega} (\vec{\Omega} R)}{1 + (l^2/v^2) \Omega^2}, \quad (2.12)$$

где

$$R = vN \left\{ \nabla F + F \nabla \ln N + \frac{eE}{v} \frac{\partial F}{\partial p} \right\}. \quad (2.13)$$

В наших выкладках мы будем считать длину свободного пробега l степенной функцией импульса:

$$l = l_n p^n. \quad (2.13')$$

Подставляя (2.12) в (2.8) и (2.9), приходим к следующим формулам для потока тепла и электричества:

$$Q_e = -\frac{uN}{2m'} \{ r_n^{(1)} S^{n+3} + r_n^{(2)} [S^{2n+2}, \vec{\Omega}] - r_n^{(3)} [\Omega^2 S^{3n+1} - \vec{\Omega} (\vec{\Omega} S^{3n+1})] \}, \quad (2.14)$$

$$j = -euN \{ r_n^{(1)} S^{n+1} + r_n^{(2)} [S^{2n}, \vec{\Omega}] - r_n^{(3)} [\Omega^2 S^{3n-1} - \vec{\Omega} (\vec{\Omega} S^{3n-1})] \}. \quad (2.15)$$

Здесь u — подвижность электронов. Далее ²

$$S^v = -em' (v+1) \chi^{v-2} E + \chi^v \nabla \ln N + \nabla \chi^v, \quad (2.16)$$

² При выводе (2.16) принято условие: $p^{v+2} F(p) |_{p=0} = 0$.

причем

$$\chi^v = 4\pi \int_0^\infty p^v F(p) p^2 dp. \quad (2.17)$$

$r_n^{(1)}, r_n^{(2)}, r_n^{(3)}$ и u выражаются через χ следующим образом:

$$u = e l_n \frac{n+2}{3} \chi^{n-1}, \quad (2.18)$$

$$r_n^{(1)} = [em' (n+2) \chi^{n-1}]^{-1}, \quad r_n^{(2)} = \frac{l_n}{e (n+2) \chi^{n-1}}, \quad r_n^{(3)} = \frac{m' l_n^2}{e (n+2) \chi^{n-1}}. \quad (2.18')$$

Формулы (2.14) и (2.15) получены в предположении, что выполняется неравенство

$$(l\Omega/v)^2 \ll 1, \quad (2.19)$$

что, очевидно, возможно при достаточно слабом магнитном поле. Имея в виду (2.19), мы ограничились при выводе (2.14) и (2.15) первыми членами разложения $[1 + (l^2/v^2) \Omega^2]^{-1}$ в ряд по степеням Ω^2 . При выводе (2.14) и (2.15) мы использовали известное определение подвижности u , как интеграла:

$$u = -\frac{4\pi}{M} \int_0^\infty \frac{l(v) v}{3} \frac{\partial f_0}{\partial (m' v^2 / 2e)} v^2 dv. \quad (2.20)$$

Если вспомнить, что коэффициент диффузии D определяется интегралом

$$D = \frac{4\pi}{N} \int_0^\infty \frac{l(v) v}{3} f_0 v^2 dv, \quad (2.21)$$

то нетрудно видеть, что в общем случае между D и u не существует соотношения $D = (kT/e)u$.

Перейдем теперь к выводу основных формул, определяющих через моменты χ^v величину того или иного термоэлектрического, термомагнитного или гальваномагнитного эффектов.

3. Термоэлектрические явления

1) Электронная составляющая теплопроводности

Выпишем, прежде всего, уравнения, определяющие поток тепла и электричества в отсутствие магнитного поля. Имеем из (2.14), (2.15) и (2.16)

$$\mathbf{Q}_e = -\frac{uN}{2m'} r_n^{(1)} \{-em' (n+4) \chi^{n+1} \mathbf{E} + \chi^{n+3} \nabla \ln N + \nabla \chi^{n+3}\}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{j} = -euN r_n^{(1)} \{-em' (n+2) \chi^{n-1} \mathbf{E} + \chi^{n+1} \nabla \ln N + \nabla \chi^{n+1}\}. \quad (3.2)$$

Для того чтобы определить электронную составляющую теплопроводности, следует вычислить поток тепла $\mathbf{Q}_e$ в отсутствие тока $\mathbf{j}$. Таким образом рассматриваемое нами явление (теплопроводность, обусловленная электронами полупроводника) характеризуется условием:

$$\mathbf{j} = 0. \quad (3.3)$$

Кроме того, не равен нулю градиент температуры

$$\nabla T \neq 0. \quad (3.4)$$

Поток тепла, как нетрудно видеть, можно записать следующим образом

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_e = & \frac{1}{2m'e} \frac{(n/2) + 2}{(n/2) + 1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \mathbf{j} - \frac{uN}{2m'} r_n^{(1)} \times \\ & \times \left\{ \nabla (\chi^{n+3}, \ln N) - \frac{(n/2) + 2}{(n/2) + 1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \nabla (\chi^{n+1}, \ln N) \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где введено сокращенное обозначение

$$\nabla (\chi^y, \ln N) = \chi^y \nabla \ln N + \nabla \chi^y. \quad (3.6)$$

Используя теперь условие (3.3) и замечая, что в отсутствие тока

$$\mathbf{Q}_e = -k_e \nabla T, \quad (3.7)$$

где k_e — электронная составляющая коэффициента теплопроводности, мы для отношения k_e/σ найдем

$$\begin{aligned} \frac{k_e}{\sigma} = & \frac{1}{2} \frac{(n/2) + 2}{[(n/2) + 1]^2} \frac{\chi^{n+1}}{(2m'e)^2 (\chi^{n-1})^2} \left\{ \frac{(n/2) + 1}{(n/2) + 2} \frac{\chi^{n-1}}{\chi^{n+1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+3}, \ln N) - \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right\}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

где σ — электропроводность полупроводника, равная

$$\sigma = euN. \quad (3.9)$$

Формула (3.8) и определяет искомый коэффициент k_e через момент χ^y . В случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания, когда³

$$\chi^n = \frac{2}{V\pi} (2m' kT)^{n/2} \Gamma\left(\frac{n+3}{2}\right), \quad (3.9')$$

формула (3.8) переходит в

$$\frac{k_e}{\sigma} = \left(\frac{k}{e}\right)^2 \left(\frac{n}{2} + 2\right) T \quad (3.10)$$

(см. также [5]).

2) Эффект Томсона

Явление состоит в выделении или поглощении дополнительного тепла (помимо джоулевского) при прохождении тока через полупроводник, вдоль которого имеется градиент температуры.

Выпишем, прежде всего, выражение для тепла q , выделяющегося в единице объема за единицу времени в полупроводнике, вдоль которого имеется градиент температуры. Формулу для q можно получить из (2.3). Именно, q дается (2.3) (без члена $\partial f/\partial t$), если предварительно умножить все уравнение на $p^2/2m'$ и проинтегри-

³ Причем $3n\chi^{3n-3}|_{n=0} = 4\pi F(r, 0)$.

ровать по всем p от 0 до ∞ . Таким образом получаем

$$q = \frac{1}{2m'} \rho (n' N \chi^2 - n'_0 N_0 \chi_0^2) + \operatorname{div} \mathbf{Q}_e + (\mathbf{E} \mathbf{j}) + \\ + \frac{\omega^2 N}{l_n} \left[(n-4) \chi^{-n+1} + \frac{\chi^{-n+3}}{m' k T} \right]. \quad (3.11)$$

Второй и третий члены в (3.11) обычны и появляются также и при отсутствии разогревания. Первый член определяет баланс тепла, поглощаемого при тепловом перебросе электронов с локальных уровней в зону проводимости и выделяемого при их возвращении на локальный уровень. Последний член представляет собой дополнительное тепло, передаваемое электронами решетки при соударениях в связи с превышением их средней энергии над энергией атомов решетки. χ_0^2 — момент χ^2 при максвелловском распределении.

Дополнительное тепло, выделяемое или поглощаемое при наличии градиента температуры, заключено во втором и третьем членах формулы (3.11). Поэтому в дальнейшем мы будем интересоваться только ими. Обозначив их сумму через q' , имеем

$$q' = \operatorname{div} \mathbf{Q}_e + (\mathbf{E} \mathbf{j}). \quad (3.12)$$

Выделим из q' джоулево тепло. С этой целью заметим, что из (3.2) следует

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma} + r_n^{(1)} \nabla (\chi^{n+1}, \ln N). \quad (3.13)$$

Подставляя (3.13) в (3.12), получаем

$$q' = \frac{j^2}{\sigma} + r_n^{(1)} (\mathbf{j} \nabla (\chi^{n+1}, \ln N)) - \frac{1}{2m'e} \left(\mathbf{j} \frac{(n/2) + 2}{(n/2) + 1} \nabla \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \right), \quad (3.14)$$

откуда для искомого тепла Томсона имеем

$$q_{\text{Томс}} = r_n^{(1)} \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) - \left(\frac{n}{2} + 2 \right) \chi^{n-1} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \right) \right] (\mathbf{j} \nabla T). \quad (3.15)$$

В случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания из (3.15) и (3.9') находим

$$q_{\text{Томс}} = \frac{kT}{e} \left[\frac{\partial \ln N}{\partial T} - \frac{3}{2T} \right] (\mathbf{j} \nabla T) \quad (3.16)$$

(см. также [5]).

3) Термоэлектричество

Вдоль полупроводника имеется градиент температуры. Между «холодным» и «горячим» концами полупроводника, к которым приложены металлические электроды, возникает разность потенциалов. Эта разность потенциалов $\Delta \varphi$ может быть определена при помощи формулы (3.2), а именно

$$\varphi_1 - \varphi_2 = -\Delta \varphi = \int_1^2 \mathbf{E} d\mathbf{r} = \int_1^2 \frac{(\mathbf{j} d\mathbf{r})}{\sigma} + \int_1^2 r_n^{(1)} \chi^{n+1} (\nabla \ln N d\mathbf{r}) + \\ + \int_1^2 r_n^{(1)} (\nabla \chi^{n+1} d\mathbf{r}). \quad (3.17)$$

На опыте наблюдается разность потенциалов между металлическими электродами, приложенными к концам полупроводника.

Если Φ_1 — контактная разность потенциалов между металлическим электродом с «холодной» стороны и полупроводником, а Φ_2 — контактная разность потенциалов между металлическим электродом с «горячей» стороны и полупроводником, то

$$V_{\text{тэдс}} = \varphi_1 - \varphi_2 + \Phi_2 - \Phi_1 = \int_1^2 \frac{(j \, dr)}{\sigma} + (r_n^{(1)} \chi^{n+1})_2 - (r_n^{(1)} \chi^{n+1})_1 - \\ - \int_1^2 \chi^{n+1} \left(\frac{\partial r_n^{(1)}}{\partial r} dr \right) + (r_n^{(1)} \chi^{n+1} \ln A)_2 - (r_n^{(1)} \chi^{n+1} \ln A)_1 + \quad (3.18) \\ + \left\{ 1 - \left(\frac{r_n^{(1)} \chi^{n+1} e}{kT} \right)_2 \right\} \Phi_2 - \left\{ 1 - \left(\frac{r_n^{(1)} \chi^{n+1} e}{kT} \right)_1 \right\} \Phi_1 - \int_1^2 \ln N (\nabla (r_n^{(1)} \chi^{n+1}) dr),$$

где A_1 и A_2 — постоянные, связанные с граничными концентрациями электронов N_1 и N_2 следующими соотношениями:

$$N_1 = A_1 \exp[-e\Phi_1/kT], \quad (3.19)$$

$$N_2 = A_2 \exp[-e\Phi_2/kT]. \quad (3.20)$$

Для коэффициента термоэдс α , определяемого из соотношения

$$\alpha = \lim_{T_2 \rightarrow T_1} \frac{V_{\text{тэдс}}(j=0)}{T_2 - T_1}, \quad (3.21)$$

из (3.18) получаем

$$\alpha = r_n^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}) + \frac{\partial}{\partial T} (r_n^{(1)} \chi^{n+1} \ln A) - \\ - \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{e r_n^{(1)} \chi^{n+1}}{kT} - 1 \right] \Phi - \ln N \frac{\partial}{\partial T} (r_n^{(1)} \chi^{n+1}). \quad (3.22)$$

Для максвелловского распределения и при отсутствии разогревания для α имеет место выражение (см. [5]):

$$\alpha = -\frac{k}{e} \left\{ \frac{n}{2} + 2 + \frac{\varepsilon - \zeta}{kT} \right\}, \quad (3.23)$$

где $\varepsilon - \zeta$ — энергетическое расстояние между дном зоны проводимости и уровнем химического потенциала.

Заметим, что в случае термоэлектричества, когда внешний ток отсутствует, разогревания электронного газа может не произойти из-за малости электрических полей, возникших при заданном градиенте температуры. В этом случае электронный газ можно разогревать, пропуская, например, дополнительный ток в направлении, перпендикулярном градиенту температуры (по оси z).

4. Гальваномагнитные явления

Гальваномагнитные явления имеют место при наложении магнитного поля на полупроводник, по которому течет ток. Выберем направление тока за ось x , направление поперечного магнитного поля —

за ось z . Если сначала ограничиться поперечными эффектами, то достаточно для их определения выписать выражения для потоков тепла и электричества с точностью до членов, пропорциональных первой степени напряженности магнитного поля B включительно. Имеем

$$Q_e = -\frac{uN}{2m'} r_n^{(1)} \{-em' (n+4) \chi^{n+1} E + \chi^{n+3} \nabla \ln N + \nabla \chi^{n+3}\} - \\ -\frac{uN}{2m'} r_n^{(2)} [-em' (2n+3) \chi^{2n} E + \chi^{2n+2} \nabla \ln N + \nabla \chi^{2n+2}, \vec{\Omega}]; \quad (4.1)$$

$$j = -eu N r_n^{(1)} \{-em' (n+2) \chi^{n-1} E + \chi^{n+1} \nabla \ln N + \nabla \chi^{n+1}\} - \\ -eu N r_n^{(2)} [-em' (2n+1) \chi^{2n-2} E + \chi^{2n} \nabla \ln N + \nabla \chi^{2n}, \vec{\Omega}]. \quad (4.2)$$

Рассмотрим теперь каждый эффект в отдельности.

1) Эффект Холла

Этот эффект, как известно, состоит в том, что при прохождении тока через полупроводник (в направлении оси x), на который наложено поле в направлении оси z , между концами полупроводника в направлении оси y возникает некоторая эдс. Таким образом мы прежде всего имеем условия

$$\Delta T = 0, \quad j_y = 0. \quad (4.3)$$

Следует определить $E_y = -\partial\varphi/\partial y$. Из условия $j_y = 0$ находим

$$E_y = \frac{2n+1}{(n+2)^2} \frac{\chi^{2n-2}}{[\chi^{n-1}]^2} \frac{3u}{c} E_x B. \quad (4.4)$$

Заменяя теперь E_x через j/euN , мы найдем

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{2n+1}{(n+2)^2} \frac{\chi^{2n-2}}{[\chi^{n-1}]^2} \frac{3}{eNc} jB, \quad (4.5)$$

откуда для коэффициента Холла получаем следующее выражение:

$$R_{из} = \frac{2n+1}{(n+2)^2} \frac{\chi^{2n-2}}{[\chi^{n-1}]^2} \frac{3}{eNc}. \quad (4.6)$$

Используя (3.9), легко находим из (4.6) выражение для коэффициента Холла в случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания [5]:

$$R_{из} = \frac{3V\pi}{4} \frac{\Gamma(n + 3/2)}{\Gamma^2(\frac{n}{2} + 2)} \frac{1}{eNc} \quad (4.7)$$

2) Эттингсгаузен-эффект

Явление состоит в появлении поперечного градиента температуры $\partial T/\partial y$ в полупроводнике, помещенном во внешнее магнитное поле (по оси z), при прохождении тока через полупроводник (в направлении оси x). Имеем следующие условия:

$$\partial T/\partial x = 0, \quad j_y = 0, \quad Q_y = 0. \quad (4.8)$$

Здесь Q — полный поток тепла, являющийся суммой тепла, переносимого решеткой

$$Q_p = -k_p \nabla T, \quad (4.9)$$

и тепла, переносимого электронами Q_e .

Из условия $j_y = 0$ находим $\partial\varphi/\partial y$, а именно

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{(\partial/\partial y)(\chi^{n+1}, \ln N)}{em'(n+2)\chi^{n+1}} + \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} m' l_n E_x \Omega. \quad (4.10)$$

Градиент поля $-\partial\varphi/\partial y$ входит также в уравнения, вытекающие из условия $Q_y = 0$:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\varphi}{\partial y} = & \frac{(\partial/\partial y)(\chi^{n+3}, \ln N)}{em'(n+4)\chi^{n+1}} + \frac{n+3/2}{(n/2)+2} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{n+1}} m' l_n E_x \Omega + \\ & + \frac{k_p}{\sigma[(n/2)+2] r_n^{(1)} \chi^{n+1}} \frac{\partial T}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Исключая из (4.10) и (4.11) $\partial\varphi/\partial y$ и используя формулы (3.8), 4.6) и $j \approx enNE_x$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial y} = & -\frac{(n/2)+2}{2n+1} \frac{\sigma}{k_e+k_p} \frac{\chi^{n-1}}{m'e\chi^{2n-2}} \times \\ & \times \left\{ \frac{n+3/2}{(n/2)+2} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{n-1}} - \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}\chi^{n+1}}{(\chi^{n-1})^2} \right\} R_{из} B j. \end{aligned} \quad (4.12)$$

В случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания, используя (3.9'), находим

$$\frac{\partial T}{\partial y} = -\frac{kT}{e} \frac{n-1}{2} \frac{\sigma}{k_p+k_e} R_{из} B j \quad (4.13)$$

(см. также [5]).

Проводя выкладки, аналогичные приведенным выше, можно вычислить адиабатический эффект Холла — разность потенциалов, возникающих вдоль направления оси y , при отсутствии потоков тепла и электричества в этом направлении.

Условие $j_y = 0$ можно еще записать в таком виде:

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial y} = r_n^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} \left(\chi^{n+1}, \ln N \right) \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} m' l_n E_x \Omega. \quad (4.14)$$

Заменяя здесь $\partial T/\partial y$ по формуле (4.13) и преобразуя член с Ω , мы найдем

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\varphi}{\partial y} = & R_{ал} j B = R_{из} j B \left\{ 1 - \frac{(n/2)+2}{2n+1} \frac{\sigma}{k_e+k_p} \frac{r_n^{(1)}}{m'e} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \times \right. \\ & \times \left. \left[\frac{n+3/2}{(n/2)+2} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{2n-2}} - \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

В случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания (4.15) принимает вид:

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial y} = R_{из} j B \left\{ 1 - \frac{n-1}{2} \frac{1}{k_p+k_e} \left(k_e + \frac{kT}{e} \sigma q_{Томс}^0 \right) \right\}, \quad (4.16)$$

где

$$q_{\text{Томс}}^n = \frac{kT}{e} \left[\frac{\partial \ln N}{\partial T} - \frac{3}{2T} \right]. \quad (4.17)$$

Заметим, что в работе [5], где приводится формула, аналогичная (4.16), перед $\sigma q_{\text{Томс}}^n$ стоит не kT/e , как должно быть (это даже можно усмотреть из соображения размерности), а k/e .

Определим еще $\partial T/\partial y$ в отсутствие поля в направлении оси y . Таким образом к условиям (4.8) следует прибавить и следующее:

$$\partial \varphi / \partial y = 0. \quad (4.18)$$

Полагая в уравнении $Q_y = 0$, $E_y = 0$, мы из него находим

$$- \left[k_p + \frac{\sigma}{2 m' e} r_n^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+3}, \ln N) \right] \frac{\partial T}{\partial y} = (n + 3/2) \sigma r_n^{(2)} \chi^{2n} E_x \Omega. \quad (4.19)$$

Используя (4.6), окончательно получаем

$$\frac{\partial T}{\partial y} = - \frac{[(n+2)(n+3/2)/(2n+1)^{-1} (\chi^{2n} \chi^{n-1} / \chi^{2n-2}) r_n^{(1)}] \sigma R_{\text{из}} jB}{k_p + \left(\frac{n}{2} + 2 \right) \sigma \chi^{n-1} [r_n^{(1)}]^2 \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+3}, \ln N)} \quad (4.20)$$

В случае максвелловского распределения и отсутствия разогревания (4.20) принимает вид [5]:

$$\frac{\partial T}{\partial y} = - \frac{kT}{e} \frac{(n + 3/2) R_{\text{из}} jB}{k_p + k_e \left[T \left(\frac{\partial \ln N}{\partial T} \right) + \frac{n+3}{2} \right]}. \quad (4.21)$$

3) Изменение сопротивления в магнитном поле

Это явление относится к числу квадратичных относительно B эффектов и характеризуется условиями

$$\nabla T = 0, \quad j_y = 0. \quad (4.22)$$

Чтобы вычислить относительное изменение электропроводности в магнитном поле $\Delta \sigma / \sigma = \sigma - \sigma(B) / \sigma$, где $\sigma(B)$ — электропроводность полупроводника в магнитном поле, выпишем $\mathbf{j}$ с точностью до членов, пропорциональных B^2 включительно. Имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & -euNr_n^{(1)} \{ -em'(n+2)\chi^{n-1}\mathbf{E} + \nabla\chi^{n+1} + \chi^{n+1}\nabla\ln N \} - \\ & -euNr_n^{(2)} [-em'(2n+1)\chi^{2n-2}\mathbf{E} + \nabla\chi^{2n} + \chi^{2n}\nabla\ln N, \vec{\Omega}] + \\ & + euNr_n^{(3)} \{ \Omega^2 (-em'3n\chi^{3n-3}\mathbf{E} + \nabla\chi^{3n-1} + \chi^{3n-1}\nabla\ln N) - \\ & - \vec{\Omega}(\vec{\Omega} (-em'3n\chi^{3n-3}\mathbf{E} + \nabla\chi^{3n-1} + \chi^{3n-1}\nabla\ln N)) \}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Учитывая условия (4.22), мы для j_x и j_y отсюда найдем следующие выражения:

$$\begin{aligned} j_x = & -euN \{ -r_n^{(1)} em'(n+2)\chi^{n-1}E_x - em'(2n+1)\chi^{2n-2}E_y\Omega + \\ & + r_n^{(3)} em'3n\chi^{3n-3}E_x\Omega^2 \}; \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} j_y = & -euN \{ -r_n^{(1)} em'(n+2)\chi^{n-1}E_y + \\ & + r_n^{(2)} em'(2n+1)\chi^{2n-2}E_x\Omega \} = 0. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Определяя из уравнения (4.25) E_y и подставляя полученное значение в (4.24), мы найдем для j_x следующее значение:

$$j_x = \sigma E_x \left\{ 1 - \frac{9B^2 u^2}{(n+2)^2 (\chi^{n-1})^2 c^2} \left[\frac{\chi^{3n-3}}{\chi^{n-2}} \frac{3n}{n+2} - \left(\frac{2n+1}{n+2} \right)^2 \left(\frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} \right)^2 \right] \right\}. \quad (4.26)$$

Откуда, принимая во внимание (4.6), окончательно получаем

$$\frac{\sigma - \sigma(B)}{\sigma} = R_{\text{из}}^2 \sigma^2 \left[\frac{3n(n+2)}{(2n+1)^2} \frac{\chi^{3n-3} \chi^{n-1}}{(\chi^{2n-2})^2} - 1 \right] B^2. \quad (4.27)$$

При максвелловском распределении и отсутствии разогревания (4.27) принимает вид [6]:

$$\frac{\sigma - \sigma(B)}{\sigma} = R_{\text{из}}^2 \sigma^2 \left(\frac{b_n}{a_n^2} - 1 \right) B^2, \quad (4.28)$$

где

$$a_n = \frac{3V\pi}{4} \frac{\Gamma(n+3/2)}{\Gamma^2[(n/2)+2]}; \quad b_n = \frac{9\pi}{16} \frac{\Gamma[(3n/2)+1]}{\Gamma^3[(n/2)+2]}. \quad (4.29)$$

4) Эффект Нернста

Явление состоит в появлении добавочного продольного градиента температуры (вдоль оси x), когда полупроводник, вдоль которого течет ток (по оси x), помещается в поперечное магнитное поле. Эффект Нернста характеризуется следующими начальными условиями:

$$Q_x = 0; \quad Q_y = 0; \quad j_y = 0. \quad (4.30)$$

Прежде всего из условия $Q_x^0 = 0$ (где значок 0 означает, что соответствующая величина берется в отсутствие внешнего магнитного поля) находим первоначальное значение градиента температуры $\partial T / \partial x_0$ через j_x . Имеем

$$\frac{\partial T}{\partial x_0} = \frac{(1/2m'e)}{k_e + k_p} \frac{(n/2) + 2}{(n/2) + 1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} j_x. \quad (4.31)$$

Теперь следует найти изменение градиента температуры при помещении полупроводника в поперечное магнитное поле (во всех случаях у нас магнитное поле направлено по оси z). Условия (4.30) запишутся в развернутом виде следующим образом:

$$j_y = 0 = -enN \{ r_n^{(1)} S_y^{n+1} - r_n^{(2)} S_x^{2n} \Omega - r_n^{(3)} S_y^{3n-1} \Omega^2 \}. \quad (4.32)$$

Далее

$$Q_x = 0 = -(k_e + k_p) \frac{\partial T}{\partial x} - r_n^{(2)} \Omega \frac{\sigma}{2m'e} S_y^{2n+2} + r_n^{(2)} \Omega \frac{\sigma}{2m'e} \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} S_y^{2n} - \\ - r_n^{(3)} \frac{\sigma}{2m'e} \Omega^2 \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} S_x^{3n-1} + r_n^{(3)} \Omega^2 \frac{\sigma}{2m'e} S_x^{3n+1}, \quad (4.33)$$

$$Q_y = 0 = -(k_e + k_p) \frac{\partial T}{\partial y} + r_n^{(2)} \Omega \frac{\sigma}{2m'e} S_x^{2n+2} - r_n^{(2)} \Omega \frac{\sigma}{2m'e} \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} S_x^{2n} - \\ - r_n^{(3)} \Omega^2 \frac{\sigma}{2m'e} \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} S_y^{3n-1} + r_n^{(3)} \Omega^2 \frac{\sigma}{2m'e} S_y^{3n+1}. \quad (4.34)$$

Для нахождения $\partial T / \partial x$ с точностью до членов, пропорциональных B^2 включительно, в формулах (4.32), (4.33) и (4.34) в членах,

пропорциональных Ω^2 , вместо точных значений $S_{x,y}^{3n-1}$, $S_{x,y}^{3n+1}$, можно брать их значения в нулевом приближении, т. е. при отсутствии внешнего магнитного поля. В членах же, пропорциональных Ω , следует $S_{x,y}^{2n}$, $S_{x,y}^{2n+1}$ вычислить с точностью до членов, пропорциональных лишь B включительно. При этом уравнения (4.32) и (4.34) служат соответственно для определения E_y и $\partial T/\partial y$ (обе эти величины вычисляются с точностью до первой степени B включительно). Уравнение (4.33) определяет искомую величину $\partial T/\partial x$. После простых, но громоздких выкладок для разности $(\partial T/\partial x) - (\partial T/\partial x_0)$ получается следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 & (k_p + k_e) \left(\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial T}{\partial x_0} \right) = \\
 & = \frac{(\sigma R_{из} B)^2}{2(m'e)(2n+1)\chi^{2n-2}} \left\{ 3n \frac{(n/2)+1}{n+1/2} \frac{\chi^{n-1}}{\chi^{2n-2}} \left[\frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} - \frac{n+2/3}{n} \frac{\chi^{3n-1}}{\chi^{3n-3}} \right] \chi^{3n-3} - \right. \\
 & - \left[\frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} (2n+1) \chi^{2n-2} - (2n+3) \chi^{2n} \right] \Bigg\} j_x + \frac{\sigma (\sigma R_{из} B)^2}{2(m'e)^3 (2n+1) \chi^{2n-2}} \times \\
 & \times \left\{ \frac{(n/2)+1}{n+1/2} \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{3n+1}, \ln N) - \frac{n+2/3}{(n/3)+2/3} \frac{\chi^{3n-1}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] \frac{\chi^{n-1}}{\chi^{2n-2}} - \right. \\
 & - \frac{(n/2)+2}{n+1/2} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{2n-2}} \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{3n-1}, \ln N) - \frac{3n}{n+2} \frac{\chi^{3n-3}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] + \\
 & + \left(\frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} - \frac{n+2/2}{n+1/2} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{2n-2}} \right) \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{2n}, \ln N) - \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] \Bigg\} \times \\
 & \times \frac{\partial T}{\partial x_0} - \frac{\sigma^2}{k_e + k_p} \frac{(\sigma R_{из} B)^2}{4(m'e)^4 (2n+1)^3 [\chi^{2n-2}]^2} \times \\
 & \times \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{2n+2}, \ln N) - \frac{n+3/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] - \right. \\
 & - \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{2n}, \ln N) - \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] \Bigg\}^2 \frac{\partial T}{\partial x_0} + \\
 & + \frac{\sigma (\sigma R_{из} B)^3}{4(m'e)^3 (2n+1) \chi^{2n-2}} \left\{ \frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{2n}, \ln N) - \frac{n+1/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n-2}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] - \right. \\
 & - \left[\frac{\partial}{\partial T} (\chi^{2n+2}, \ln N) - \frac{n+3/2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{n-1}} \frac{\partial}{\partial T} (\chi^{n+1}, \ln N) \right] \Bigg\} \times \\
 & \times \left[\frac{(n/2)+2}{(n/2)+1} \frac{\chi^{n+1}}{\chi^{n-1}} - \frac{n+3/2}{n+1/2} \frac{\chi^{2n}}{\chi^{2n-2}} \right] \frac{j_x}{k_e + k_p}. \quad (4.35)
 \end{aligned}$$

В случае максвелловского распределения и отсутствия разогрева формула (4.35) переходит в следующую:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial T}{\partial x_0} = & - \frac{kT}{e} \frac{(R_{из} \sigma I)^2}{k_e + k_p} j_x \left\{ \frac{n-1}{2} \left(2 \frac{b_n}{a_n^2} - 1 \right) - \right. \\
& - \frac{k_e}{k_e + k_p} \left[\frac{(n-1)/2}{(n/2) + 2} \left(\frac{11}{4} - \frac{n}{4} \right) + \frac{b_n}{a_n^2} \left(n^2 - \frac{n}{2} + 2 \right) \right] + \\
& \left. + \left(\frac{k_e}{k_e + k_p} \right)^2 \frac{|((n+1)/2)^2 + 3/2|^3}{(n/2) + 2} \right\}. \quad (4.36)
\end{aligned}$$

В работе [5], как показала тщательная проверка, при выводе формулы (4.36) допущены ошибки. В [5] [формула (27)] вместо $\frac{(n-1)/2}{(n/2) + 2} \left(\frac{11}{4} - \frac{n}{4} \right)$ ошибочно стоит $\frac{n-1}{2} \frac{n^2+9}{4}$, а также вместо $\left[\left(\frac{n+1}{2} \right)^2 + \frac{3}{2} \right] \left(\frac{n}{2} + 2 \right)^{-1}$ просто $\left[\left(\frac{n+1}{2} \right)^2 + \frac{3}{2} \right]^2$.

Физико-технический институт.
Академии наук Узбекской ССР

Поступила в редакцию
13 июня 1953 г.

Литература

- [1] Б. И. Давыдов. ЖЭТФ, 7, 1069, 1937.— [2] К. С. Шифрин. Журн. техн. физики, 14, 49, 1944.— [3] А. И. Ансельми и В. И. Клячкин. ЖЭТФ, 22, 297, 1952.— [4] R. Wright. Proc. Phys. Soc., 64, 984, 1951.— [5] К. Б. Толпыго. Тр. Ин-та физики АН УССР, 3, 52, 1952.— [6] Н. Л. Писаренко. Изв. АН СССР, сер. физич., 5, 417, 1941.

ЗАПИСЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Ю. К. Хохлов

Показано, что взаимодействие системы частиц с электромагнитным полем может быть выражено непосредственно через напряженности поля, независимо от калибровки потенциалов. Дано общее определение мультипольных моментов и рассмотрено их применение в теории радиационных переходов.

1. Введение

Обычно энергия взаимодействия частиц с внешним электромагнитным полем выражается через потенциалы поля, а не через напряженности. Это, однако, не вызвано физической необходимостью. При определенном выборе базиса в гильбертовом пространстве волновых функций частиц (или при эквивалентной такому выбору калибровке потенциалов) обнаруживается (см. п. 2 настоящей статьи), что зависимость взаимодействия от потенциалов представлена только значением скалярного потенциала в начале координат, т. е. аддитивной постоянной, а в остальном взаимодействие зависит лишь от напряженностей поля.

Это обстоятельство позволяет вполне общим и единственным образом определить мультипольные моменты как такие операторы, через которые выражается энергия системы в электрическом (электрические моменты) и в магнитном (магнитные моменты) полях (см. п. 3).

В качестве примера практического использования мультипольных моментов мы дадим в п. 4 формулы для мультипольных радиационных переходов (случай поглощения) и попутно коснемся старого вопроса [1-3] о независимости выражений для электрических моментов от наличия обменных сил.

2. Исходная форма гамильтониана

Рассмотрим систему частиц, находящуюся в заданном внешнем электромагнитном поле и подчиняющуюся волновому уравнению:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(A, \Phi) \psi,$$

$$H(A, \Phi) = H(A, 0) + \sum_{\alpha} e_{\alpha} \Phi(\mathbf{r}_{\alpha}, t), \quad (1)$$

где $H(A, \Phi)$ — гамильтониан, описывающий взаимодействие частиц с полем и между собой; e_{α} и $\mathbf{r}_{\alpha}$ — заряд и координата α -й частицы; $A(\mathbf{r}, t)$ и $\Phi(\mathbf{r}, t)$ — векторный и скалярный потенциалы поля.

Обозначим через $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ некоторую функцию, произвольно зависящую от координат и времени; при введении вместо ψ новых волновых функций ψ'

$$\psi' = \prod_{\alpha} \exp \left\{ -\frac{ie_{\alpha}}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right\} \psi \quad (2)$$

волновое уравнение преобразуется к виду

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H'(\mathbf{A}, \Phi) \psi',$$

где

$$H'(\mathbf{A}, \Phi) = \prod_{\alpha} \exp \left\{ -\frac{ie_{\alpha}}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right\} H(\mathbf{A}, \Phi) \prod_{\beta} \exp \left\{ \frac{ie_{\beta}}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}_{\beta}, t) \right\} + \\ + \sum_{\alpha} e_{\alpha} \left[\Phi(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \frac{\partial}{c \partial t} \Lambda(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right]. \quad (3)$$

Гамильтониан (1) должен обладать свойством градиентной инвариантности, которое состоит в том, что при калибровочном преобразовании потенциалов

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \nabla \Lambda,$$

$$\Phi \rightarrow \Phi + (\partial / c \partial t) \Lambda, \quad (4)$$

гамильтониан (1) изменяется так же, как при унитарном преобразовании (2).

Отсюда следует, что

$$\prod_{\alpha} \exp \left\{ -\frac{ie_{\alpha}}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right\} H(\mathbf{A}, 0) \prod_{\beta} \exp \left\{ \frac{ie_{\beta}}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}_{\beta}, t) \right\} = H(\mathbf{A} - \nabla \Lambda, 0).$$

Полагаем

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \int_0^{\mathbf{r}} A_s(s, t) ds \quad (5)$$

(интеграл берется по прямой $\mathbf{r}$; A_s означает проекцию $\mathbf{A}$ на направление $\mathbf{r}$). В силу формулы

$$\nabla \int_0^{\mathbf{r}} A_s ds = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{1}{r} \int_0^{\mathbf{r}} [\mathbf{s}, \text{rot } \mathbf{A}] ds$$

и очевидного соотношения

$$\Phi(\mathbf{r}) - \Phi(0) = \int_0^{\mathbf{r}} (\nabla \Phi)_s ds$$

получим

$$H'(\mathbf{A}, \Phi) = H \left(-\frac{1}{r} \int_0^{\mathbf{r}} [\mathbf{s}, \text{rot } \mathbf{A}] ds, 0 \right) + \\ + \sum_{\alpha} e_{\alpha} \int_0^{\mathbf{r}_{\alpha}} \left(\nabla \Phi + \frac{\partial}{c \partial t} \mathbf{A} \right)_s ds + \Phi(0) \sum_{\alpha} e_{\alpha}.$$

В случае, когда рассматривается взаимодействие с внешним полем, можно положить

$$\Phi(0) = 0, \quad (6)$$

тогда

$$H'(\mathbf{A}, \Phi) = H\left(-\frac{1}{r} \int_0^r [\mathbf{s}, \mathbf{H}] ds, 0\right) - \sum_{\alpha} e_{\alpha} \int_0^{r_{\alpha}} E_s ds. \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ — напряженности магнитного и электрического полей:

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - (\partial/cdt)\mathbf{A}; \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением линейных членов гамильтониана (7), записав его в виде

$$H'(\mathbf{A}, \Phi) = H(0, 0) + H_1\left(-\frac{1}{r} \int_0^r [\mathbf{s}, \mathbf{H}] ds\right) - \sum_{\alpha} e_{\alpha} \int_0^{r_{\alpha}} E_s ds, \quad (8)$$

оператор $H_1(\mathbf{A})$ является вторым (линейным) членом разложения гамильтониана (1) по степеням $\mathbf{A}$ и, как можно показать, удовлетворяет равенству

$$(\psi, H_1(\mathbf{A})\psi) = -\frac{1}{c} \int (\mathbf{I}(\mathbf{r}), \mathbf{A}(\mathbf{r})) d\mathbf{r}, \quad (9)$$

где $\mathbf{I}(\mathbf{r})$ — плотность электрического тока в отсутствие поля; круглые скобки в применении к ψ -функциям означают скалярное произведение в гильбертовом пространстве ψ -функций. Плотность тока в простейшем случае¹ дается выражением

$$\begin{aligned} \mathbf{I}(\mathbf{r}) = & \left(\psi, -\sum_{\alpha} \frac{i\hbar e_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \nabla_{\alpha} \psi \right) + \text{компл. сопр.} + \\ & + c \text{rot}_{\mathbf{r}} \left(\psi, \sum_{\alpha} \vec{\mu}_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \psi \right), \end{aligned} \quad (10)$$

где m_{α} и $\vec{\mu}_{\alpha}$ — масса и собственный магнитный момент α -й частицы.

В заключение настоящего раздела покажем, как выглядит результат (7) в случае, например, задачи о движении классической частицы в заданном внешнем электромагнитном поле. Функция Лагранжа для частицы имеет вид:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) - e\Phi(\mathbf{r}).$$

Производя калибровочное преобразование (4), (5) при условии (6), получим

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L}_0(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) - \frac{e}{c} \left(\frac{\dot{\mathbf{r}}}{r} \int_0^r [\mathbf{s}, \mathbf{H}] ds \right) + e \int_0^r E_s ds,$$

$$H'(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = H_0\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \frac{1}{r} \int_0^r [\mathbf{s}, \mathbf{H}] ds, \mathbf{r}\right) - e \int_0^r E_s ds,$$

в полном согласии с (7).

¹ Подробнее см. ниже, п. 5.

3. Мультипольные моменты

Итак, энергия взаимодействия системы с электромагнитным полем может быть записана в виде суммы двух членов: электрического, зависящего от плотности заряда и напряженности электрического поля, и магнитного, зависящего от плотности тока и напряженности магнитного поля. При разложении полей по каким-либо функциям электрический член разлагается по электрическим моментам, магнитный — по магнитным. В частности, напряженности свободного электромагнитного поля, характеризующегося волновым числом k , могут быть разложены в ряды вида

$$\begin{aligned} E_k &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{\lambda=1}^2 E_{k,l,m,\lambda} Y_{k,l,m,\lambda}, \\ H_k &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{\lambda=1}^2 H_{k,l,m,\lambda} Y_{k,l,m,\lambda}, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} Y_{k,l,m,1} &= \sqrt{\frac{2\pi(l+1)}{l(2l+1)}} \left[l(f_{l-1} + f_{l+1}) \frac{r}{r} Y_{l,m} + \left(f_{l-1} - \frac{l}{l+1} f_{l+1} \right) r \nabla Y_{l,m} \right]; \\ Y_{k,l,m,2} &= \sqrt{\frac{2\pi(2l+1)}{l(l+1)}} f_l [r, \nabla Y_{l,m}]. \end{aligned}$$

Здесь $f_l = \sqrt{\pi/2kr} J_{l+1/2}(kr)$; $J_{l+1/2}(kr)$ — функция Бесселя индекса $l+1/2$; $Y_{l,m}$ — нормированная шаровая функция от направления вектора r .

Величины $Y_{k,l,m,\lambda}$ (рассмотренные, например, в работе [4]) нормированы следующим образом:

$$\int Y_{k,l,m,\lambda} Y_{k',l',m',\lambda'}^* d\mathbf{r} = \pi^2 k^{-2} (2l+1) \delta(k-k') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \delta_{\lambda,\lambda'},$$

откуда

$$E_{k,l,m,\lambda} = \pi^{-2} (2l+1)^{-1} \int E_k Y_{k',l,m,\lambda} k'^2 dk' d\mathbf{r}.$$

Коэффициент $H_{k',l,m,\lambda}$ определяется аналогично.

Укажем еще следующие соотношения:

$$\text{rot } Y_{k,l,m,1} = -k Y_{k,l,m,2}, \quad \text{rot } Y_{k,l,m,2} = -k Y_{k,l,m,1}.$$

Подставляя (11) в исходный гамильтониан (8), получим

$$\begin{aligned} H'(\mathbf{A}, \Phi) &= H(0, 0) - \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E_{k,l,m,1} Q'_{k,l,m} - \\ &- \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{\lambda=1}^2 H_{k,l,m,\lambda} M'_{k,l,m,\lambda}, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} Q'_{k,l,m} &= \int \rho(\mathbf{r}) \int_0^r (Y_{k,l,m,1})_s ds d\mathbf{r} = \\ &= \sqrt{\frac{2\pi l(l+1)}{(2l+1)}} \int \rho(\mathbf{r}) \int_0^r (f_{l-1} + f_{l+1}) ds Y_{l,m} d\mathbf{r} \approx \\ &\approx \sqrt{\frac{2\pi l(l+1)}{l(2l+1)}} \frac{k^{-1}}{(2l-1)!!} \int \rho(\mathbf{r}) (kr)^l Y_{l,m} d\mathbf{r}; \\ \rho(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha} e_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}); \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
M'_{h,l,m,1} &= H_1 \left(\frac{1}{r} \int_0^r [s, Y_{h,l,m,1}] ds \right) = \\
&= \sqrt{\frac{2\pi(l+1)}{l(2l+1)}} H_1 \left(\frac{1}{r} \int_0^r s \left(f_{l-1} - \frac{l}{l+1} f_{l+1} \right) ds [r, \nabla Y_{l,m}] \right) \approx \\
&\approx \sqrt{\frac{2\pi}{l(l+1)(2l+1)}} \frac{k^{-1}}{(2l-1)!!} H_1((kr)^l [r, \nabla Y_{l,m}]); \\
M'_{h,l,m,2} &= H_1 \left(\frac{1}{r} \int_0^r [s, Y_{h,l,m,2}] ds \right) = -\sqrt{\frac{2\pi(2l+1)}{l(l+1)}} H_1 \left(\int_0^r s f_l ds, \nabla Y_{l,m} \right) \approx \\
&\approx -\sqrt{\frac{2\pi}{l(l+1)(2l+1)}} \frac{k^{-1}}{(2l-1)!!(l+2)} H_1((kr)^{l+1} r \nabla Y_{l,m}).
\end{aligned}$$

Из равенства (8) следует, что

$$\begin{aligned}
(\psi, M'_{h,l,m,1} \psi) &= \\
&= -\frac{1}{c} \sqrt{\frac{2\pi(l+1)}{l(2l+1)}} \int \frac{1}{r} \int_0^r s \left(f_{l-1} - \frac{l}{l+1} f_{l+1} \right) ds (\mathbf{l}, [r, \nabla Y_{l,m}]) dr, \\
(\psi, M'_{h,l,m,2} \psi) &= \frac{1}{c} \sqrt{\frac{2\pi(2l+1)}{l(l+1)}} \int \frac{1}{r} \int_0^r s f_l ds (\mathbf{l}, r \nabla Y_{l,m}) dr.
\end{aligned}$$

Величину $Q'_{h,l,m}$ назовем абсолютным электрическим $2l$ -польным моментом; величины $M'_{h,l,m,1}$ и $M'_{h,l,m,2}$ — абсолютными $2l$ -польными магнитными моментами первого и второго рода, соответственно. Приближенные равенства в формулах (13) относятся к предельному случаю больших длин волн, когда можно считать выполненным условие $kr \ll 1$.

Кратко охарактеризуем работы [5,6], содержащие определения мультипольных моментов при $kr \ll 1$. Электрические моменты [5] совпадают с $Q'_{h,l,m}$ (различие нормировок нас не интересует), магнитные моменты [5] (первого рода, согласно нашей терминологии) определены несколько отлично от (13). Определение [6] отличается от (13) трактовкой собственного магнитного момента частиц. Согласно этому определению, собственные магнитные моменты дают вклад в электрический момент системы, что, конечно, физически бессмысленно.

Выпишем для справок несколько моментов при $kr \ll 1$

(14)

$$\begin{aligned}
Q'_{h,1,0} &\approx \sum_{\alpha} e_{\alpha} (\mathbf{e}^0 \mathbf{r}_{\alpha}); & Q'_{h,1,\pm 1} &\approx \sum_{\alpha} e_{\alpha} (\mathbf{e}^{\pm} \mathbf{r}_{\alpha}); \\
Q'_{h,2,0} &\approx \frac{\sqrt{3}}{4} k \sum_{\alpha} e_{\alpha} \left((\mathbf{e}^0 \mathbf{r}_{\alpha})^2 - \frac{1}{3} r_{\alpha}^2 \right); & Q'_{h,2,\pm 1} &\approx \frac{1}{2} k \sum_{\alpha} e_{\alpha} (\mathbf{e}^0 \mathbf{r}_{\alpha}) (\mathbf{e}^{\pm} \mathbf{r}_{\alpha}); \\
M'_{h,1,0,1} &\approx H_1 \left(-\frac{1}{2} [\mathbf{e}^0, \mathbf{r}] \right); & M'_{h,1,\pm 1,1} &\approx H_1 \left(-\frac{1}{2} [\mathbf{e}^{\pm}, \mathbf{r}] \right); \\
M'_{h,1,0,2} &\approx H_1 \left(\frac{k}{6} [[\mathbf{e}^0, \mathbf{r}], \mathbf{r}] \right); & M'_{h,1,\pm 1,2} &\approx H_1 \left(\frac{k}{6} [[\mathbf{e}^{\pm}, \mathbf{r}], \mathbf{r}] \right); \\
\mathbf{e}^{\pm} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x \pm i \mathbf{e}_y).
\end{aligned} \tag{14}$$

Здесь $\mathbf{e}^0$, $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ — орты осей x , y и z .

Абсолютные мультипольные моменты (13) зависят от выбора начала отсчета координат (трансляционно неинвариантны), в большинстве же физических задач приходится иметь дело не с абсолютными, а с относительными (трансляционно инвариантными) моментами $Q_{h,l,m}$ и $M_{h,l,m,\lambda}$ (без штрихов!), которые формально получаются из $Q_{h,l,m}$ и $M_{h,l,m,\lambda}$, путем замены всех величин на относительные. При этом интегралы вида $\int_0^r A_s ds$ заменяются на $\int_Q^r A_s ds$ (Q — координата центра масс частиц); плотность тока $I(r)$ заменяется на плотность относительного тока

$$j(r) = I(r) - \rho(r) \left(\int \rho(r') dr' \right)^{-1} \int I(r'') dr'';$$

абсолютные координаты r_a — на относительные, $\vec{r}_a = \vec{r}_a - Q$.

Заметим, что название «мультипольные моменты» естественно сохранить именно за моментами (13) ввиду их связи с мультипольными радиационными переходами (см. ниже). Вообще же существуют и другие моменты, которые получаются, если вместо шаровых векторов $Y_{h,l,m,\lambda}$ воспользоваться какой-либо другой системой векторных функций. В простейших случаях поля E и H можно разложить в степенные ряды, тогда взаимодействие окажется представленным в виде суммы так называемых [3] приводимых моментов, хорошо известных из классической теории электричества². Действительно,

$$\begin{aligned} \int_0^r E_s ds &= x_l (E_l)_{r=0} + \frac{1}{2} x_l x_m \left(\frac{\partial E_l}{\partial x_m} \right)_{r=0} + \frac{1}{3!} x_l x_m x_n \left(\frac{\partial^2 E_l}{\partial x_m \partial x_n} \right)_{r=0} + \dots, \\ \left(\psi, H_1 \left(\frac{1}{r} \int_0^r [s, H] ds \right) \psi \right) &= \frac{1}{2c} [r, I]_l (H_l)_{r=0} + \\ &+ \frac{2}{3!c} [r, I]_l x_m \left(\frac{\partial H_l}{\partial x_m} \right)_{r=0} + \frac{3}{4!c} [r, I]_l x_m x_n \left(\frac{\partial^2 H_l}{\partial x_m \partial x_n} \right)_{r=0} + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь x_1, x_2, x_3 — проекции r на оси координат, индексы l, m, n пробегает значения 1, 2, 3; по одинаковым индексам производится суммирование.

4. Мультипольные радиационные переходы

Как известно, свободное поле может быть разложено по плоским волнам, каждая из которых соответствует фотону с определенными импульсом и поляризацией. Известно также, что в ряде задач оказывается необходимым разлагать поле не по плоским волнам, а по сферическим l -волнам, которым соответствуют фотоны с определенной энергией, моментом количества движения (квантовое число l), проекцией момента количества движения (квантовое число m) и четностью. При калибровке $\Phi(r) = 0$ электрическая (магнитная) l -волна пропорциональна шаровой функции $Y_{h,l,m,1}$ ($Y_{h,l,m,2}$).

На первый взгляд кажется, что для рассмотрения радиационных переходов достаточно разложить свободное поле по l -волнам, обычным

² См., например, [7], стр. 112—122.

способом произвести квантование и получить таким образом в общем виде матричные элементы поглощения и испускания электрических и магнитных квантов. В действительности вопрос осложняется одним обстоятельством, которое состоит в следующем.

Объектом нашего рассмотрения является, как правило, свободная система частиц, невозмущенные волновые функции которой образуют $\mathbf{p}$ -представление в пространстве координаты $\mathbf{Q}$ центра масс и l -представление в пространстве относительных координат. В этих условиях квантование по сферическим волнам естественным образом учитывает сохранение момента количества движения и четности, но плохо приспособлено для учета сохранения импульса. Иными словами, указанный выше способ квантования, вообще говоря, не соответствует физическим условиям задачи, хотя и является формально правильным. Поэтому в задаче о мультипольных радиационных переходах квантование следует производить как обычно, не по сферическим, а по плоским волнам, с последующим разложением относительного движения фотона по парциальным l -волнам. При этом взаимодействие оказывается выраженным не через абсолютные, а через относительные $2l$ -польные моменты.

Приведем результат, относящийся к случаю поглощения (нерелятивистское приближение для частиц).

Матричный элемент поглощения фотона с импульсом $\hbar \mathbf{k}$ и поляризацией

$$\mathbf{e}^{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x \pm i \mathbf{e}_y),$$

дается формулой

$$(H_1)_{f0} = \left(\psi_f, H_1 \left(\mathbf{e}^{\pm} \sqrt{\frac{2\pi \hbar c}{k L^3}} e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}} \right) \psi_0 \right), \quad (16)$$

где L^3 — нормировочный объем, ψ_f и ψ_0 — волновые функции начального и конечного состояний в лабораторной системе координат:

$$\psi_f = L^{-3/2} \exp\left(\frac{i \mathbf{p}_f \mathbf{Q}}{\hbar}\right) \varphi_f(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \dots),$$

$$\psi_0 = L^{-3/2} \varphi_0(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \dots).$$

$\mathbf{p}_f$ — конечный суммарный импульс. Напомним, что $\vec{\rho}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{Q}$, где $\mathbf{Q}$ — координата центра масс

$$\mathbf{Q} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} / \sum_{\beta} m_{\beta}.$$

На основании (12) матричный элемент (16) преобразуется к следующей сумме

$$\begin{aligned} (H_1)_{f0} = \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ -i^{l-1} \sqrt{\frac{2\pi \hbar}{ck L^3}} (\varphi_f, \dot{Q}_{h,l,\pm 1} \varphi_0) \delta_{\mathbf{p}_f, \hbar \mathbf{k}} - \right. \\ \left. - i^{l+1} \sqrt{\frac{2\pi \hbar ck}{L^3}} (\varphi_f, M_{h,l,\pm 1,2} \varphi_0) \delta_{\mathbf{p}_f, \hbar \mathbf{k}} \pm \right. \\ \left. \pm i^{l+1} \sqrt{\frac{2\pi \hbar ck}{L^3}} (\varphi_f, M_{h,l,\pm 1,1} \varphi_0) \delta_{\mathbf{p}_f, \hbar \mathbf{k}} \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

Первые два члена представляют собой матричный элемент поглощения электрической парциальной l -волны, последний член — матричный элемент поглощения магнитной l -волны.

При получении формулы (27) мы воспользовались приведенным в работе [4] разложением плоской волны по функциям $Y_{k,l,m,\lambda}$.

$$i e^{\pm i k r} = \sum_{l=1}^{\infty} (i^l Y_{k,l,\pm 1,1} \mp i^l Y_{k,l,\pm 1,2}).$$

5. Обсуждение

Результат (17) состоит в следующем: взаимодействие системы с электрической сферической парциальной волной выражается через магнитный момент второго рода и через электрический момент; взаимодействие с магнитной волной — через магнитный момент первого рода. (Напомним, что имеются в виду относительные моменты.) При $kr \ll 1$ взаимодействие с каждой волной выражается через одноименный момент, так как магнитный момент второго рода при этом условии много меньше электрического момента той же мультипольности.

Это последнее обстоятельство оказывается весьма существенным для расчета радиационных переходов ядер. Известно, что при наличии обменных сил электрический ток складывается из обычного тока (10) и так называемого «обменного тока», обусловленного заряженными мезонами. Вследствие неудовлетворительного состояния современной мезонной теории внутриядерный обменный ток неизвестен, а следовательно, частично неизвестен и полный ток, определяющий магнитные моменты ядра³. Матричный элемент в форме (16) соответствует такой форме записи (9) энергии взаимодействия системы с полем, при которой вся энергия оказывается формально выраженной через ток. Фактически же при длинах волн, намного превышающих эффективный размер ядра, взаимодействие с электрическим квантом, согласно (17), от тока не зависит, что и позволяет рассматривать электрические переходы, не обращаясь к мезонной теории.

Вопрос этот уже обсуждался в литературе. Еще в [1] было предложено пользоваться для дипольных электрических переходов обычной формулой, независимо от наличия обменных сил. В работе [2] была сделана попытка распространить результаты работы [1] на все высшие мультипольные электрические переходы. Один из недостатков этой работы заключается в том, что авторы определили мультипольные моменты как результат разложения плоской волны по степеням kr . При $l > 2$ введенные ими моменты (приводимые моменты см. в п. 3 настоящей статьи) не имеют ничего общего с мультипольными.

Наконец, в работе [3] предложено общее определение мультипольных моментов, относящееся к случаю произвольных kr . Отличие этого определения от (13) состоит в том, что та часть гамильтониана, которая трактуется авторами как совокупность электрических моментов, в действительности зависит от магнитного поля, и эта зависимость заметно сказывается при больших kr .

Вообще, все работы по мультипольным моментам можно охарактеризовать как попытки «наиболее удачным образом» разбить гамильтониан на электрическую и магнитную части (в смысле, сформулированном в начале пункта 3 настоящей статьи). При этом, однако, остается некоторая (малая) часть, которая не является ни чисто маг-

³ Другими словами, частично неизвестен оператор H_1 .

нитной, ни чисто электрической. В настоящей работе разбиение оказывается полным (остаток равен нулю). В этом смысле определение (13) является единственным.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 августа 1953 г.

Литература

- [1] A. J. F. Siegert. Phys. Rev., 52, 787, 1937. — [2] R. G. Sachs a. N. Austern. Phys. Rev., 81, 705, 1951. — [3] J. G. Breunann a. R. G. Sachs. Phys. Rev., 88, 824, 1952. — [4] В. Б. Берестецкий, А. З. Долгиков и К. А. Тер-Мартirosян. ЖЭТФ, 20, 527, 1950. — [5] В. Б. Берестецкий. ЖЭТФ, 17, 12, 1947. — [6] V. F. Weisskopf. Phys. Rev., 83, 1073, 1951. — [7] Л. Ландау и Е. Лифшиц. Теория поля, ГИТТЛ, М., 1948.
-

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ КОНВЕКЦИЯ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ

Г. А. Остроумов

Развиваются и дополняются результаты работы [1], относящиеся к расчету электростатической конвекции в цилиндрических капиллярах, заполненных электролитом.

1. Исходные уравнения

Уравнениями, описывающими явления в толще жидкого электролита, являются:

уравнение потенциала

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi}{K} \sum \rho_n; \quad (1)$$

уравнения непрерывности для потоков электрических зарядов

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = -\dot{\rho}_n; \quad (2)$$

уравнения плотности тока

$$\mathbf{j}_n = -\operatorname{grad} \varphi \cdot u_n \rho_n - D_n \operatorname{grad} \rho_n + \mathbf{v} \rho_n; \quad (3)$$

гидродинамическое уравнение движения Навье-Стокса, которое в несколько измененном и приспособленном для дальнейших расчетов виде напишем так:

$$\gamma \{\dot{\mathbf{v}} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v}\} = -\operatorname{grad} p + \mathbf{g} \gamma - \operatorname{grad} \varphi \cdot \sum \rho_n + \mu \Delta \mathbf{v}; \quad (4)$$

гидродинамическое уравнение непрерывности

$$\operatorname{div} \gamma \mathbf{v} = -\dot{\gamma}; \quad (5)$$

наконец, уравнение плотности жидкости

$$\gamma = \gamma_0 + \sum \frac{\partial \gamma}{\partial \rho_n} \rho_n. \quad (6)$$

Здесь приняты следующие обозначения: n — номер данного сорта ионов из числа m , находящихся в жидкости; φ — потенциал в данной точке жидкости; K — диэлектрическая постоянная жидкости; ρ_n — удельная плотность зарядов данного сорта ионов номер n , т. е. электростатический заряд 1 см³ жидкости, обусловленный ионами именно данного сорта; $\mathbf{j}_n$ — плотность электрического тока в жидкости, обусловленная движением ионов именно сорта n ; $\mathbf{j}$ — полная плотность тока в жидкости; u_n — подвижность ионов сорта n ; D_n — коэффициент диффузии данного сорта ионов, см²/сек.; $\mathbf{v}$ — скорость жидкости в данной точке, см/сек.; γ — плотность раствора, г/см³;

γ_0 — плотность растворителя; $\mathbf{g}$ — вектор ускорения силы тяжести, $g = 981$ см/сек²; μ — динамический коэффициент вязкости жидкости, г/см сек., $\Delta = (\partial^2/\partial x^2) + (\partial^2/\partial y^2) + (\partial^2/\partial z^2)$ — оператор Лапласа. Все электрические величины считаются выраженными в электростатической системе единиц.

В этих уравнениях не учтено нагревание жидкости ни проходящим током, ни движением вязкой жидкости, ни иными источниками тепла — условия считаются строго изотермическими. Законность этого предположения представляет собой физическую гипотезу, требующую своего экспериментального исследования.

В уравнениях (1) — (6) неизвестными являются: потенциал φ , давление p , плотности зарядов различных ионов ρ_n , плотности токов, обусловленных движением различных ионов, $\mathbf{j}_n$, скорость жидкости $\mathbf{v}$, суммарная плотность тока $\mathbf{j}$ и плотность жидкости γ , всего $2m + 5$ неизвестных (из них $m + 2$ векторных). Для нахождения этих неизвестных имеем совместные однократные уравнения (1), (4) — (6) и $2m + 1$ уравнений (2) и (3), всего $2m + 5$ уравнений (из них $m + 2$ векторных). Поэтому решение этой системы вполне определено.

Каждое из уравнений (3) означает, что внутри жидкости ионы данного сорта не возникают и не исчезают (они могут, конечно, возникать и исчезать на электродах). Однако исследования Полукарова [2] указывают на то, что в некоторых случаях ионы металлов вблизи катода разряжаются на каких-то других ионах, превращаясь в коллоид мелкодисперсного металла. Повидимому, количественных законов такого разряжения одних ионов на какие-то другие внутри жидкости пока не установлено. Когда они будут установлены, они помогут составить некоторое число уравнений дополнительно к вышеприведенным.

Для интегрирования этих дифференциальных уравнений необходимо предварительное установление определенных граничных условий. В соответствии с порядком уравнений для уравнений (1) и (4) нужно по две произвольных постоянных, для уравнения (5) — одна, для уравнений (2) и (3) — по m произвольных постоянных — всего $2m + 5$ произвольных постоянных. Для полного определения этих постоянных необходимо иметь $2m + 5$ граничных условий.

Не будем останавливаться на отдельных причудливых распределениях давления по границам сосуда; это само по себе — и без электростатики — представляет труднейшую задачу гидродинамики.

Примем в качестве основного граничного условия наличие на границах прилипшего к стенкам слоя жидкости. Тогда скорость жидкости на границе S

$$\mathbf{v}_S = 0. \quad (7)$$

Повидимому, во многих случаях, когда опыты проводятся в открытых сосудах, так что жидкость соприкасается с воздухом, открытая поверхность жидкости также является твердой, будучи покрыта хрупким слоем поверхностно-активных веществ. Для такой поверхности условие (7) справедливо. В противном случае, т. е. когда жидкость достаточно чиста сама по себе и соприкасается по открытой поверхности не более, чем со своим собственным насыщенным паром, придется допустить возможность наличия горизонтальной скорости жидкости на этой открытой поверхности, и взамен жесткого условия (7) пользоваться облегченным условием

$$\{[\mathbf{g} \cdot \mathbf{v}]\}_S = 0. \quad (8)$$

На диэлектрических стенках сосуда ионы любого сорта стацио-

нарно не отлагаются, т. е. нормальная составляющая плотности ионного тока на них

$$(j_n)_{NS} = 0. \quad (9)$$

На электропроводных стенках сосуда при прохождении тока ионы отлагаются или растворяются в стационарном режиме непрерывно. Число их может быть в простых случаях определено по показаниям миллиамперметра, а в сложных — путем количественного анализа осадка или раствора («до опыта» и «после опыта»). Поэтому для этих стенок левая часть уравнения (9) может считаться численно известной.

На электропроводных металлических стенках обычно с достаточной точностью можно полагать, что потенциал каждого сорта стенки одинаков.

Кроме того, можно полагать, что разность потенциалов между стенками разного сорта (но металлическими!) — с учетом скачков потенциала в слое Гельмгольца — Штерна — известна (из показаний вольтметра или компенсатора):

$$\varphi_S = \Phi_S. \quad (10)$$

В некоторых очень тонких опытах, вероятно, можно полагать, что известен общий заряд жидкости, т. е., что известна величина

$$\iiint \sum_{n=1}^m \rho_n dx dy dz. \quad (11)$$

Однако считать эту величину надежно известной вряд ли обосновано. Вероятно, в некоторых случаях можно с учетом констант диссоциации считать известными такие частные интегралы:

$$\frac{1}{\epsilon z_n} \iiint \rho_n dx dy dz. \quad (12)$$

Каждый из них представляет запас диссоциированных ионов сорта n в объеме экспериментального сосуда. Понятно, что в формулах (11) и (12) не должны учитываться ионы, растворенные с электродов в момент сборки экспериментальной установки, а также ионы, адсорбированные стенками.

Таким образом известными могут считаться следующие граничные условия: одно вида (7) или (8), одно вида (10) и $2m$ вида (9) и (12), всего $2m + 2$ условия — на три условия меньше того, сколько нужно. Поэтому неизвестные величины могут быть из перечисленных условий определены не вполне точно, а лишь с точностью до трех произвольных постоянных.

В некоторых задачах могут возникать обстоятельства, увеличивающие точность нахождения неизвестных. Например, во многих задачах условие конечности функций и их производных может играть роль граничных условий.

Возможно также, что в отдельных случаях адсорбирующая способность по отношению к каждому сорту ионов может считаться известной. Это даст новые граничные условия [ср. ниже уравнение (22)]. Поэтому вполне возможно, что число граничных условий, формулируемых в этой задаче на основании различных соображений, окажется больше, чем $2m + 5$. Это будет означать, что не все эти граничные условия могут быть заданы по произволу, т. е., что некоторые из них являются следствиями других.

Уравнения (1), (2) и (6) — линейные, уравнения же (3) — (5) — нелинейные. Поэтому исключительно важное значение имеют те частные случаи, где нелинейность если не устраняется полностью из уравнений, то по крайней мере ограничивается меньшим числом членов, так что к этим оставшимся членам можно применить метод последовательных приближений. Иногда устраняется нелинейность из тех членов, в которые входит скорость, так как та категория случаев, когда мы можем эту скорость полагать весьма малой, очень обширна. Это относится, в первую очередь, к комбинации $(\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v}$, обычно (в ламинарных потоках) малой по сравнению с $\mu \Delta \mathbf{v}$. Сверх того, существует специальный случай, когда эта комбинация точно равна нулю. Это получается тогда, когда скорость всех точек жидкости параллельна или антипараллельна одному определенному направлению (образующей цилиндрической трубы). В этих случаях уравнение (4), оставаясь нелинейным в своем кулоновском члене, становится линейным в отношении скорости, и поэтому приобретает следующее важное свойство: оно допускает суперпозицию скоростей. В силу этого свойства действительную гидродинамическую скорость $\mathbf{v}$ можно рассматривать в таких случаях как векторную сумму трех независимых скоростей, одна из которых обусловлена только градиентом давления, т. е. паскалевским членом уравнения, вторая — только гравитационным эффектом, т. е. архимедовским членом уравнения, и третья — только электростатическим эффектом, т. е. кулоновским членом уравнения. Эти три причины вызывают как бы три независимых друг от друга взаимно пронизывающих течения жидкости. Суммарное течение удовлетворяет уравнению (5) и входит в уравнения вида (3). Граничным условиям должно удовлетворять суммарное течение.

2. Бинарный электролит в круглом капилляре из диэлектрического материала

Пусть просвет цилиндрического круглого капилляра, изготовленного из диэлектрического материала, заполнен жидкостью, содержащей ионы противоположных знаков только двух сортов ($m = 2$). Для простоты положим их одновалентными: $z_1 = 1, z_2 = -1$. Концентрацию зарядов, обусловленную каждым из ионов (с учетом константы диссоциации при температуре опыта) в толще большой массы жидкости обозначим через ρ_0 . Жидкость находится в покое. Внешних электростатических полей нет. Ток равен нулю. Гравитационным эффектом пренебрегаем.

При этих условиях у нас сохраняются лишь уравнения (1) и (3), которым можно придать такой вид:

$$-\Delta \varphi = \frac{4\pi\rho_0}{K} \left(\frac{\rho_1}{\rho_0} - \frac{\rho_2}{\rho_0} \right), \quad (13)$$

$$-\text{grad } \varphi = \frac{kT}{\varepsilon} \text{grad } \ln \frac{\rho_1}{\rho_0} = -\frac{kT}{\varepsilon} \text{grad } \ln \frac{\rho_2}{\rho_0}. \quad (14)$$

Отсюда

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\rho_2}{\rho_0} = e^{-\varepsilon(\varphi - \Phi)/kT}, \quad (15)$$

и далее

$$\Delta \varphi = \frac{8\pi\rho_0}{K} \text{sh} \left[\frac{\varepsilon}{kT} (\varphi - \Phi) \right]. \quad (16)$$

Наконец,

$$\Delta \psi = (8\pi\rho_0\varepsilon / kTK) \text{sh } \psi. \quad (17)$$

Здесь Φ означает постоянную интегрирования, а именно потенциал в той точке жидкости, где действительная концентрация ионов обоих сортов точно равна ρ_0 и где поэтому $\Sigma \rho_n = 0$. Буквой ψ обозначен безразмерный потенциал:

$$\psi = \frac{e}{kT} (\varphi - \Phi) = -\ln \frac{\rho_1}{\rho_0} = \ln \frac{\rho_2}{\rho_0}. \quad (18)$$

e — заряд электрона, k — постоянная Больцмана.

Нелинейное уравнение (17) совпадает с уравнением (202) работы [3] (стр. 128 и след.), описывающим поле около иона или шарообразной коллоидной частицы. Уравнение линеаризуется и решается совсем легко в том случае, когда можно полагать, что безразмерный потенциал ψ мал по сравнению с единицей, т. е. когда концентрация ионов у стенок капилляра не сильно отличается от их концентрации в толще большого сосуда. Например, когда $\rho_1/\rho_0 = 2$, то $\ln(\rho_1/\rho_0) \approx 0,69$, $\text{sh } 0,69 \approx 0,75$, т. е. отличается от 0,69 на неполных 9% ([4], стр. 35). Это — случай тонких капилляров из материала со слабой адсорбционной способностью, заполненных разбавленными слабо диссоциированными электролитами (в том числе не водными).

Заменяем нелинейное уравнение (17) линейным, которое для цилиндрической задачи при осевой симметрии приобретает вид:

$$\Delta\psi \equiv \psi'' + \frac{1}{r}\psi' = \frac{1}{h^2}\psi; \quad (19)$$

$$\psi'_1 \equiv d\psi/dr; \quad \psi'' \equiv d^2\psi/dr^2.$$

Здесь величина

$$h \equiv \sqrt{kTK/8\pi\rho_0\varepsilon} \quad (20)$$

имеет размерность длины. Ее условно называют толщиной диффузного слоя. Для водного бинарного одновалентного электролита при комнатной температуре она составляет приблизительно ([3], стр. 134 уравнение (229))

$$h \approx \frac{3 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{c}} \text{ см},$$

где c — концентрация в молях на литр. Граничными условиями являются:

1) осевая симметрия и конечность потенциала

$$(\psi')_{r=0} = 0; \quad (21)$$

2) напряженность электростатического поля у стенки

$$E = (-|\text{grad } \varphi|)_{r=R} = -\frac{kT}{e}(\psi')_{r=R}. \quad (22)$$

Эта величина характеризует адсорбционную активность материала стенки капилляра: εE представляет собой ту специфическую силу притяжения, которую стенка из данного материала может развивать по отношению к ионам данного сорта, имеющим валентность $z_2 = -1$. Величину E считаем известной, не зависящей от концентрации ионов и определяемой материалом стенки и родом раствора.

В этих граничных условиях линеаризованное уравнение (19) имеет известное решение:

$$\psi = \psi_0 J_0\left(i \frac{r}{h}\right). \quad (23)$$

При этом

$$E = -\frac{kT}{\varepsilon} \psi'(R) = -\frac{kT}{\varepsilon h} \psi_0 \left[-iJ_1 \left(i \frac{R}{h} \right) \right]; \quad (24)$$

$$\psi_0 = -\varepsilon h E / kT \left[-iJ_1 \left(i \frac{R}{h} \right) \right].$$

Тогда

$$\varphi(r) - \Phi = \frac{kT}{\varepsilon} \psi(r) = \frac{kT}{\varepsilon} \psi_0 J_0 \left(i \frac{r}{h} \right) = -hE \frac{J_0(ir/h)}{-iJ_1(iR/h)}. \quad (25)$$

При широких капиллярах, когда $r \rightarrow R \rightarrow \infty$, это выражение стремится к пределу:

$$-hE \sqrt{\frac{R}{r}} e^{-(R-r)/h} \rightarrow -hE e^{-(R-r)/h}.$$

Необходимо подчеркнуть, что электрическое поле в жидкости внутри капилляра совершенно не будет однородным: потенциал меняется с радиусом вовсе не по линейному закону.

Обычно стенки адсорбируют отрицательные ионы. Заряд этих отрицательных ионов вынуждает положительные ионы концентрироваться вблизи стенки. Поэтому напряженность поля бывает направлена от оси капилляра к его периферии, а потенциал убывает от оси к периферии (ср. ниже рис. 1). Если незаряженный электричеством — нейтральный — капилляр наполняется незаряженной жидкостью, то какие бы перемещения ионов внутри этой системы ни происходили, ее общий заряд останется электрически нейтральным. Если потенциал в окрестности системы был нуль, то он таким и останется. «Окрестности» системы как раз и начинаются в толще диэлектрика на внешней границе адсорбированных ионов.

Действительно, можно допустить, что такое положение в идеальном случае и возможно. Тогда в отсутствие слоя Гельмгольца — Штерна можно ожидать на границе:

$$\varphi(R) = \Phi - hE \frac{J_0(iR/h)}{-iJ_1(iR/h)} = 0. \quad (26)$$

Исключив отсюда и из (25) произвольную постоянную интегрирования Φ , получим внутри жидкости

$$\varphi(r) = \frac{hE [J_0(iR/h) - J_0(ir/h)]}{-iJ_1(iR/h)}. \quad (27)$$

Для широких капилляров $r \rightarrow R \rightarrow \infty$ это выражение стремится к $hE [1 - e^{-(R-r)/h}]$.

В действительности такая примитивная картина не точно обрисовывает действительность, если капилляр находится в соединении с тем большим сосудом, из которого он наполнялся. Жидкость, обедненная отрицательными ионами (ввиду того, что они адсорбированы стенкой), не будет находиться в электростатическом равновесии с жидкостью в большом сосуде, где обеднения не получилось. Отрицательные ионы из большого сосуда будут медленно диффундировать в капилляр. Так же и положительные ионы будут диффундировать из капилляра в большой сосуд. Поэтому через длительное время, когда равновесие восстановится, суммарный заряд капилляра будет не нулем, а отрицательным относительно жидкости большого сосуда, которая окажется положительно заряженной.

Чем уже капилляр, тем медленнее процесс диффузии, но зато тем больше соответствующая поправка к потенциалу. Возможно, что в некоторых случаях, когда в электролите присутствуют объемистые

мелкодисперсные, губчатые или ворсинчатые осадки, а также в ряде биологических случаев это явление играет важную роль.

Таким образом, обозначив через $\Phi_{\text{ГШ}}$ и $\Phi_{\text{д}}$ не зависящие от координаты r поправки типа Гельмгольца — Штерна и диффузионного типа, вместо (27) нужно писать

$$\varphi(r) = hE \frac{J_0(ir/h) - J_0(ir/h)}{-iJ_1(ir/h)} + \Phi_{\text{ГШ}} - \Phi_{\text{д}}. \quad (28)$$

На рис. 1 изображено распределение потенциала φ в отсутствие обеих поправок для двух случаев: разбавленного и концентрированного растворов бинарного равно-валентного электролита, причем радиусы капилляра, а также материал стенок (т. е. величина E) одинаковы. Для разбавленного раствора положено $h = R$, для концентриро-

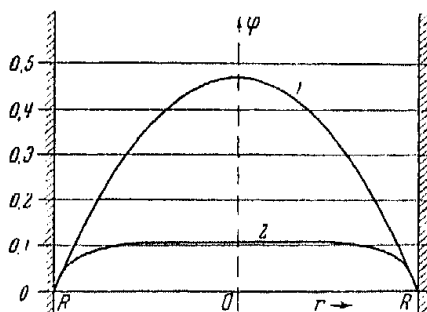


Рис. 1. Распределение потенциала φ в отсутствие поправок. 1 — $h = R$ (разбавл.), 2 — $10h = R$ (концентр.)

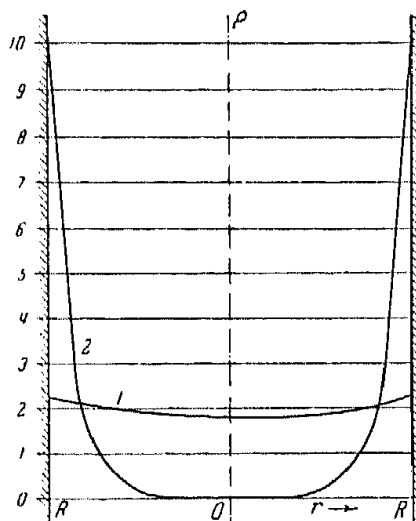


Рис. 2. Распределение плотности заряда. 1 — $h = R$ (разбавл.), 2 — $10h = R$ (концентр.)

ванного $10h = R$. По формуле (20) это отношение соответствует стократному отношению концентраций ρ_0 . Единицей для измерения потенциала принято значение RE .

На рис. 2 изображено соответствующее распределение плотности зарядов. Единицей для измерения ρ принято значение $KE/4\pi R$. Из рисунка видно, что при разбавленном растворе плотность зарядов положительного знака почти одинакова по сечению капилляра, тогда как в концентрированном растворе она изменяется почти в 3000 раз.

Эти расчеты и рисунки весьма точны до тех пор, пока безразмерный потенциал ψ не превосходит на стенке капилляра значения 0,3, т. е. пока потенциал в центре капилляра не превосходит величины

$$0,3 \frac{kT}{e} = \frac{0,3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 300}{1,6 \cdot 10^{-12}} = 0,0078 \text{ V}, \quad (29)$$

$$\text{sh}(0,3)/0,3 = 1,015.$$

Если величина безразмерного потенциала выше, то расчеты становятся неточными и задача требует нелинейной трактовки. В последней формуле $1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 300$ эрг соответствует комнатной температуре, $1,6 \cdot 10^{-12}$ эрг соответствует энергии 1 eV.

На рис. 3 в грубых чертах показано распределение зарядов по Гельмгольцу — Штерну. Примерный диаметр атома помечен отрезком a . На рис. 4 эскизно показано распределение потенциала в капилляре при наличии слоя Штерна. На рис. 5 приведено распределение ско-

рости движения жидкости по радиусу капилляра для некоторых типичных случаев. Кривые вычислены для значения $R = 10h$. Кривая 1 дает распределение скорости чистого электроосмотического течения жидкости по Смолуховскому. Положительный электрод сверху, жидкость гонится вниз. Кривая 2 дает

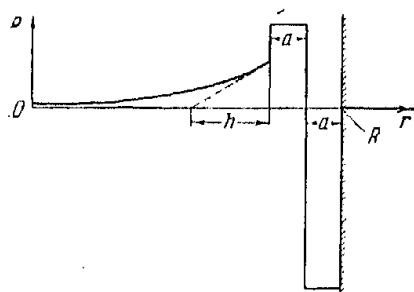


Рис. 3. Распределение зарядов по Гельмгольцу — Штерну

распределение скорости электроосмотического движения жидкости при наличии противодействия, направленного снизу вверх. Противодействие выбрано таким, что никакого итогового течения жидкости не получается. Сколько жидкости вгоняется противодействием вверх через центральную часть капилляра, столько же отсасывается электроосмосом вниз в периферическом слое. Как видно из рисунка, компенсация электроосмоса противодействием не означает, что жидкость в капилляре находится в покое. Наоборот, в ней происходит конвекция. Грубо говоря, периферические части жидкости несут заряды к отрицательному электроду, нейтрализованная жидкость через центральную часть капилляра возвращается обратно. Кривая 3 соответствует случаю измерения потенциала истечения при условии, когда током объемной проводимости можно пренебречь по сравнению с током поверхностным (сильно подвижный плохопроводящий электролит). Жидкость прохо-

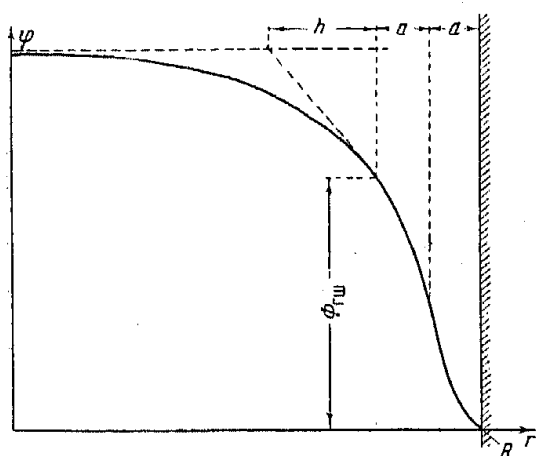


Рис. 4. Распределение потенциала в капилляре при наличии слоя Штерна

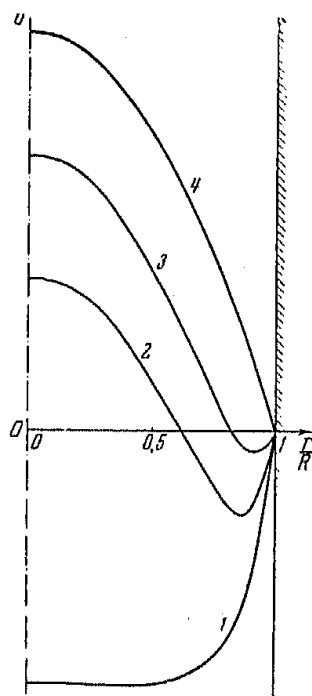


Рис. 5. Распределение скорости движения жидкости по радиусу капилляра

дит преимущественно через центральную часть капилляра и увлекает с собой заряды, расположенные в области $0 < r/R < 0,83$. Эти заряды создают «потенциал истечения», который вызывает обратное течение жидкости в узком пристеночном слое $0,83 < r/R < 1$.

Параболическая кривая 4 соответствует течению Пуазейля. Она наблюдается тогда, когда «потенциал истечения» точно равен нулю. Это может быть достигнуто искусственно путем компенсации с применением двупарных электродов, но может получиться и стихийно в случае весьма вязких, хорошо проводящих жидкостей, когда объемный ток несравнимо больше тока поверхностного.

Различные соотношения между величиной тока проводимости и тока поверхностного могут быть отображены различными кривыми,

занимающими промежуточное положение между кривыми 3 и 4. Масштабы кривых 1 и 4 выбраны так, что эти кривые соответствуют одинаковым объемным скоростям. Поэтому ординаты кривой 2 являются суммами ординат кривых 1 и 4.

3. Приближенное решение нелинейных уравнений для треугольного сечения капилляра

Скважины и пустоты, иногда заполненные электролитом, в пористых материалах (пряжа, торф, почва, ткани растений и животных и т. п.) вряд ли имеют даже отдаленное сходство с тем круглым цилиндрическим капилляром, который был рассмотрен в предыдущем разделе. Некоторым приближением к действительности могут служить электрокинетические явления в канале призматической формы. Положим, что в основании этой призмы лежит правильный треугольник, и что она вырезана в толще диэлектрического массива.

Математическое исследование электрокинетических явлений начинается с интегрирования нелинейного уравнения безразмерного потенциала, которое для бинарного одновалентного электролита записывается так:

$$\Delta\psi \equiv \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} \operatorname{sh} \psi. \quad (30)$$

Это уравнение должно быть проинтегрировано при двух граничных условиях. Во-первых, стенки канала обладают способностью удерживать около себя в диффузном слое положительные одновалентные ионы данного сорта с силой [ср. уравнение (22)]

$$\epsilon E = \epsilon (-|\operatorname{grad} \varphi|)_n = -kT \frac{\partial \psi}{\partial n}. \quad (31)$$

Другими словами, на гранях призмы нормальная составляющая градиента безразмерного потенциала известна и равна

$$\partial \psi / \partial n = -\epsilon E / kT. \quad (32)$$

Во-вторых, потенциал в полости призмы конечен; например, в центре полости

$$(\operatorname{grad} \psi)_0 = 0. \quad (33)$$

Ввиду трудности аналитического решения поставленной задачи был использован метод последовательных приближений в конечных разностях [5], причем получились результаты, представленные на рис. 6. При этом было положено

$$\frac{a}{2h} = 1; \quad \frac{\epsilon E}{kT} \frac{2a}{\sqrt{3}} = 1. \quad (34)$$

На рис. 6 изображен рельеф безразмерного потенциала, взятого с обратным знаком. Как видим, эта фигура имеет кратерообразный характер: потенциал в центре выше, чем по краям.

Кроме того, ясно видно следующее важное обстоятельство. Потенциал в разных точках треугольного периметра сечения призмы неодинаков: по середине граней он выше, чем по углам. Таким образом, в этих условиях обобщенное выражение «потенциал стенки» без указания места на стенке теряет смысл. Это обстоятельство типично для

некруглых полостей, а также для полостей нецилиндрических — полостей переменного сечения [см. соображения, приведшие к формуле (28)].

Если бы окружающий массив был электропроводным, то потенциал в различных точках стенки выравнился бы за счет протекающих по массиву токов. Но тогда градиент потенциала оказался бы неодинаковым вдоль граней: в середине граней градиент потенциала увеличился бы по абсолютной величине, в углах — уменьшился бы. В силу притягательного действия стенки в углах началось бы отложение атомов вещества, присутствующего в растворе в виде положительных ионов. На серединах граней началось бы растворение вещества электропроводной грани в виде положительных ионов. Этот процесс пойдет в затухающем темпе, пока канал не приобретет формы круглого

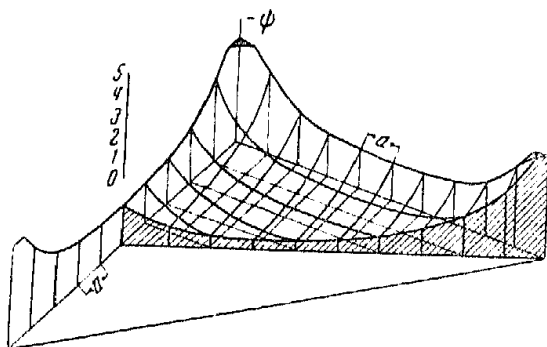


Рис. 6. Рельеф безразмерного потенциала, взятого с обратным знаком

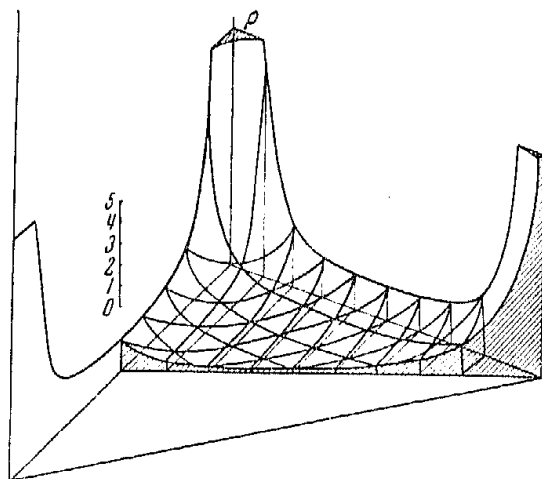


Рис. 7. Распределение плотности электрических зарядов по сечению призматической полости для случая $2\rho_0 = 1$

цилиндра. Если грань нерастворима в этом электролите, то на ней должно начаться либо выделение атомов вещества, присутствующего в растворе в виде отрицательных ионов, либо отложение тонкого неэлектропроводного (диэлектрического) слоя.

На рис. 7 изображено распределение плотности электрических зарядов по сечению призматической полости для случая $2\rho_0 = 1$. Этот рисунок показывает, какое огромное увеличение плотности объемных зарядов получается вблизи стенки (по сравнению со средней частью сечения полости), в особенности в углах полости. Понятно, что такое же скопление зарядов будет происходить в углах и трещинах полостей любой формы.

Жидкость, содержащая эти заряды, находится в электрическом поле зарядов, адсорбированных на стенках. Возникает специфическое для электролита пристеночное гидростатическое давление электростатического происхождения. Это давление как бы впрессовывает жидкость в щели полости. Ввиду того что поле потенциальное, оно не вызывает движения жидкости, а только создает гидростатическое давление. Величина этого давления высока в концентрированных электролитах, особенно в трещинах стенок, обладающих большой адсорбирующей способностью. На рис. 8 показано распределение давления вдоль медианы основного треугольника в произвольном масштабе. Наличие давления тормозит заполнение трещин электродными отложениями (в случае электропроводного массива), а в некоторых случаях может даже способствовать углублению трещин, вызывая процесс разрушения материала массива.

Если ввести в нашу полость, сделанную в диэлектрическом массиве, электроды с одного и другого ее конца и приложить к ним

небольшую разность потенциалов, то вдоль полости (вдоль оси) возникает слабое осевое электростатическое поле. Напряженность его неизмеримо меньше напряженности, обусловленной пристеночными электрическими явлениями. Поэтому это поле почти не нарушит пристеночных явлений, и роль его скажется только на растворе электролита. Эта роль сведется, во-первых, к тому, что ионы разных знаков будут двигаться к противоположным электродам внутри электролита («объемная электропроводность»). Во-вторых, пристеночные части жидкости, содержащие в избытке положительные ионы, будут стремиться к отрицательному электроду вместе с этими положительными ионами (электроосмос); это будет явлением электростатической конвекции Смолуховского (обуславливающим «поверхностную» электропроводность).

На рис. 9 построен рельеф величины v . При этом положено

$$E/4\mu = 1. \quad (35)$$

Рисунок показывает, что рельеф скоростей снижается у стенок как бы обрывом, особенно по углам, образуя в середине полости плоскогорье.

Вполне возможно, что при больших значениях $\epsilon E/kT$, чем было принято в (34), рельеф скоростей деформируется так, что вблизи углов у него возникнут горки, возвышающиеся над центральным плоскогорьем, и что крутизна периферических обрывов будет еще больше.

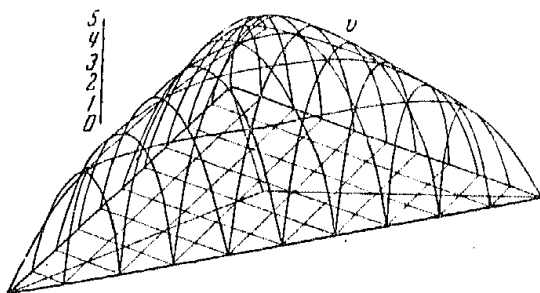
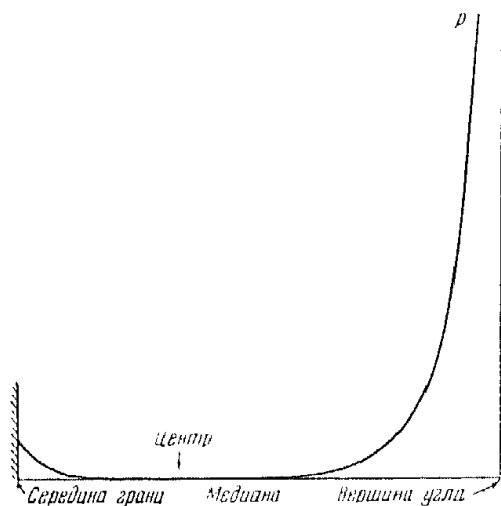

 Рис. 9. Рельеф величины v


Рис. 8. Распределение давления вдоль медианы основного треугольника в произвольном масштабе


 Рис. 10. Распределение плотности тока $j = \rho v$

Это значит, что при электроосмосе более концентрированных или более диссоциированных растворов жидкость гонится сильнее вдоль щелей и трещин, чем вдоль плоских стенок или вдоль осевой части полости.

Аналогичное явление получилось бы, если приложить к скважине противодействие. Под действием противодействия скорость жидкости убавится значительнее в центре полости, нежели вблизи углов. При предельном противодействии, когда общая объемная скорость будет равна нулю, это будет достигнуто за счет того обстоятельства, что по углам жидкость будет течь в сторону поля, а в центре — в обратную сторону.

На рис. 10 изображен рельеф плотностей «поверхностного» тока.

4. Распределение потенциалов и зарядов для случая коаксиальных цилиндров

Соображения, связанные с обсуждением рис. 6, побуждают рассчитать случай, когда по оси круглого длинного капилляра радиуса R_2 будет расположена тонкая нить радиуса R_1 из того же материала, что и стенка капилляра. Ограничимся случаем малых величин безразмерного потенциала, когда допустима линеаризация (19) уравнения (17). Проинтегрируем это уравнение при следующих условиях. Градиент потенциала на внутреннем и внешнем цилиндрах равен одной и той же величине, но, конечно, имеет обратные знаки

$$\psi'(R_2) = -\psi'(R_1). \quad (36)$$

Решение выражается через цилиндрические функции I_0 , K_0 , I_1 , K_1 следующим образом:

$$\psi = -\frac{\epsilon h E}{kT} \frac{P}{Q};$$

$$P = \left[K_1\left(\frac{R_2}{h}\right) - K_1\left(\frac{R_1}{h}\right) \right] I_0\left(\frac{r}{h}\right) - \left[I_1\left(\frac{R_2}{h}\right) - I_1\left(\frac{R_1}{h}\right) \right] K_0\left(\frac{r}{h}\right);$$

$$Q = I_1\left(\frac{R_2}{h}\right) K_1\left(\frac{R_1}{h}\right) - K_1\left(\frac{R_2}{h}\right) I_1\left(\frac{R_1}{h}\right).$$

На рис. 11 дано значение $-\psi$ для случая $R_1 = h$, $R_2 = 10h$. Сопоставив рис. 11 с рис. 6, мы снова видим, что потенциал внешнего вогнутого электрода оказался ниже, чем внутреннего выпуклого. Повторив рассуждения, связанные с рис. 6, можно прийти к следующему выводу. В случае электропроводности материала внешней стенки и центральной нити при их взаимном гальваническом соединении вещество нити будет переходить в раствор в виде положительных ионов и откладываться на внешней стенке, пока нить совершенно не растворится, или же на нити будет отлагаться вещество, содержащееся в растворе в виде отрицательных ионов. Ввиду того что электростатическое давление на внутреннем и на внешнем электродах одинаково, это давление не может помешать такому электролизу. Повидимому, этим обстоятельством может быть объяснен тот факт, что гальванические покрытия некоторых металлов получают гладкими и блестящими: электролит сам растворяет выступы и заполняет трещины.

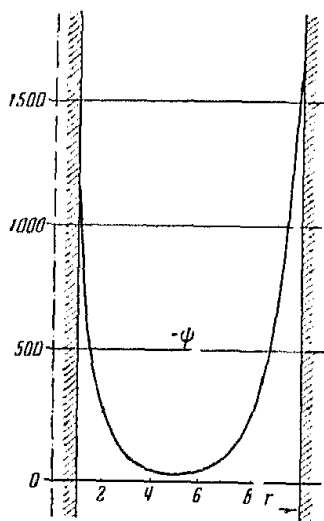


Рис. 11. Значение $-\psi$ для случая $R_1 = h$, $R_2 = 10h$

Заключение

Настоящая работа содержит перечень исходных уравнений, описывающих конвективные явления в электролитах, их обсуждение, применение этих уравнений в исходном нелинейном виде для призматической треугольной полости, а также для случая полого круглого цилиндра и двух коаксиальных цилиндров — в линеаризованном виде. Расчеты проведены для бинарных равновалентных электролитов. Для нелинейного случая расчет проведен по методу итерации в конечных разностях.

Пользуюсь случаем поблагодарить В. С. Сорокина за очень интересные соображения, высказанные им по поводу материала этой статьи.

Молотовский государственный
университет

Поступила в редакцию
17 декабря 1953 г.

Литература

- [1] Г. А. Остроумов. Тр. Комиссии по акустике АН СССР, сб. № 7, стр. 98, 1953.— [2] М. Н. Полукаров. Журн. общ. химии, 18, 1249, 1948.— [3] Г. Фалькенгаген. Электролиты, ОНТИ, Химтеоретиздат, Л., 1935.— [4] Б. И. Сегал и К. А. Семендяев. Пятизначные математические таблицы, Изд-во АН СССР, М.—Л., 1948.— [5] Д. Ю. Панов. Справочник по численному решению дифференциальных уравнений в частных производных, изд. 4-е, ГИТТЛ, М.—Л., 1950, стр. 47.
-

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ. I

РАСЧЕТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ БЕНЗОЛА И ДЕЙТЕРОБЕНЗОЛОВ (ПЛОСКИЕ КОЛЕБАНИЯ)

М. А. Ковнер

Выполнен расчет и дана интерпретация колебательных спектров бензола и дейтеробензолов. Результаты расчета сопоставлены с экспериментальными данными и находятся с ними в удовлетворительном согласии. Определена система силовых постоянных бензола, дана общая характеристика силового поля в молекуле бензола и определены коэффициенты влияния. Решение вековых уравнений позволило найти также форму колебаний бензола и гексадейтеробензола. Изучено влияние изотопозамещения на форму колебаний.

1. Введение

Изучение колебательных спектров ароматических соединений представляет собой актуальную задачу по следующим причинам.

1) В этих соединениях находят наиболее яркое проявление идеи Бутлерова и Марковникова о взаимном влиянии атомов в молекулах. Природа химической связи, характер и распределение межатомных взаимодействий обладают в ароматических соединениях рядом специфических свойств. Вместе с тем, как хорошо известно, попытки решения указанных проблем методами квантовой механики были мало успешными вследствие непреодолимых математических трудностей. Несомненно, что весьма ценная информация о силовом поле в молекулах, о подвижности их электронной оболочки, об изменениях, вызываемых введением тех или иных заместителей и т. д. может быть получена на основе теоретического и экспериментального изучения частот, интенсивностей и поляризаций в колебательных спектрах.

2) Проблема расчета электронных термов ароматических соединений и интерпретации их электронно-колебательных спектров до сих пор полностью не решена даже для бензола, не говоря уже о более сложных веществах. Необходимым этапом в решении этой проблемы является изучение и систематика колебательных спектров.

3) Изучение спектров комбинационного рассеяния и инфракрасных спектров поглощения необходимо для молекулярного спектрального анализа ароматических веществ, а также высококипящих фракций нефти.

Естественно, что систематическое рассмотрение колебательных спектров ароматических соединений должно быть начато с бензола, и настоящая работа является первой в намеченной нами серии таких исследований.

Колебательный спектр бензола был предметом многочисленных теоретических и экспериментальных работ [1]. Как известно, попытки расчета частот колебаний молекул с упрощенной потенциальной функцией не приводят к удовлетворительным результатам даже в случае простейших молекул. Тем более эти попытки не могли быть успешными в применении к бензолу. Действительно, обширный

экспериментальный материал свидетельствует о том, что фенильное кольцо в целом характеризуется определенной совокупностью частот колебаний, которые не могут быть отнесены к отдельным связям или углам между связями в кольце. Поэтому интерпретация всего колебательного спектра бензола и его дейтерозамещенных возможна лишь при соблюдении принципа учета потенциальной энергии взаимодействия между всеми структурными элементами кольца. Такой расчет был выполнен в работе [2], где были вычислены частоты колебаний C_6H_6 , C_6D_6 и некоторые частоты $C_6H_3D_3$ в хорошем согласии с опытом. Однако, как известно [3], для достоверности результатов расчета необходимо, чтобы число частот значительно превосходило число неизвестных силовых постоянных. Этому требованию работа [2] не удовлетворяет. Между тем имеющиеся достаточно полные сведения по спектрам комбинационного рассеяния и инфракрасным спектрам бензола [4] и дейтеробензолов [5, 6] позволяют решить в полном объеме задачу расчета и интерпретации спектров названных веществ с соблюдением вышеуказанного условия.

2. Составление вековых уравнений

Число плоских колебаний для каждой из молекул бензола и дейтеробензолов равно 21. Они следующим образом распределяются по неприводимым представлениям соответствующих групп симметрии:

$$\begin{aligned} C_6H_6, C_6D_6; D_{6h} : 2A_{1g} + A_{2g} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 3E_u^- + 4E_g^+, \\ sC_6H_3D_3; D_{3h} : 4A'_1 + 3A'_2 + 7E', \\ pC_6H_4D_2, pC_6H_2D_4; D_{2h} : 6A_g + 5B_{1g} + 5B_{2u} + 5B_{3u}, \\ C_6H_5D; C_{2v} : 11A_1 + 10B_1. \end{aligned} \quad (1)$$

Колебания A_{2g} , B_{1u} , B_{2u} (D_{6h}) и A'_2 неактивны как в спектрах комбинационного рассеяния, так и в инфракрасных спектрах.

Для составления и решения вековых уравнений мы пользовались методикой Волькенштейна, Ельяшевича и Степанова [3]. Обозначения 30 естественных колебательных координат, между которыми имеются 9 дополнительных соотношений [3], представлены на рис. 1. В табл. 1 даны вычисленные значения кинематических коэффициентов и обозначения 50 силовых постоянных для координат рис. 1. Далее, при помощи таблицы коэффициентов симметрии [3] были составлены координаты симметрии для всех типов колебаний (1). Наконец, по формулам типа (7.42) и (7.65а), (7.67), (7.68), (7.69) работы [3] были вычислены приведенные кинематические коэффициенты и силовые постоянные для всех неприводимых представлений (1). Следующим этапом расчета явился вывод дополнительных соотношений между координатами симметрии, являющихся следствием упомянутых выше дополнительных соотношений между естественными координатами. Затем по правилам, выведенным в [3], было выполнено исключение лишних координат. В результате этой последней операции силовые постоянные оказываются весьма сложными линейными комбинациями величин табл. 1. Для D_{6h} они имеют вид:

$$\begin{aligned} A_{1g} : (Q, Q) &= k_Q + 2h_T + 2h_{1T} + h_{2T} = 11,70; \\ (Q, q) &= 2(h_q + h_{1q} + h_{2q}) = 0,68; \end{aligned} \quad (2)$$

$$(q, q) = k_q + 2k_1 + 2k_2 + k_3 = 8,63;$$

$$A_{2g} : (\beta, \beta) = k_\beta - n_\beta - l_\beta + 2p - s_\beta + 2p_1 - s_{1\beta} + p_2 - l_{2\beta} - l_{1\beta} = 0,68;$$

$$B_{1u} : (\gamma, \gamma) = k_\gamma - 2n_\gamma + 2s_\gamma - s_{1\gamma} - 2(l_{\gamma\beta} - m - r + t + r_1 - t_1) + \\ + \frac{1}{2}(k_\beta - n_\beta + l_\beta - 2p + s_\beta + 2p_1 - s_{1\beta} - l_{1\beta} - p_2 + l_{2\beta}) = 1,65; \\ (\gamma, q) = b_\gamma - 2d_\gamma + 2d_{1\gamma} - d_{2\gamma} - a_\beta - d_{1\beta} + d_\beta + d_{2\beta} - a_{2\beta} + a_{1\beta} = \\ = -0,30;$$

$$(q, q) = k_q - 2k_1 + 2k_2 - k_3 = 8,63;$$

$$B_{2u} : (Q, Q) = k_Q - 2h_\gamma + 2h_{1\gamma} - h_{2\gamma} = 7,55;$$

$$(Q, \beta) = -\sqrt{2}(A_\beta - B_\beta - C_{\gamma\beta} + B_{1\beta} + C_{1\gamma\beta} - B_{2\beta}) = 0,27;$$

$$(\beta, \beta) = k_\beta + n_\beta - l_\beta - 2p - s_\beta + 2p_1 + s_{1\beta} - p_2 - l_{2\beta} + l_{1\beta} = 0,82;$$

$$E_u^- : (Q, Q) = k_Q + h_\gamma - h_{1\gamma} - h_{2\gamma} - \frac{2\sqrt{3}}{s} [(A_\gamma - C_{1\gamma}) - \\ - \frac{1}{2}(A_\beta + B_\beta - C_{1\gamma\beta} - B_{2\beta})] + \frac{1}{s^2} [(k_\gamma + n_\gamma - s_\gamma - s_{1\gamma}) - (2l_{\gamma\beta} + m + r - \\ - t - r_1 - 2t_1)] + \\ + \frac{1}{2}(k_\beta + \frac{1}{2}n_\beta + l_\beta + p - \frac{1}{2}s_\beta - p_1 - s_{1\beta} - p_2 - \frac{1}{2}l_{2\beta} + \frac{1}{2}l_{1\beta})] = 11,20, \\ (\frac{1}{s} = 0,784);$$

$$(Q, \beta_a) = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_\beta - B_\beta + 2C_{\gamma\beta} - 2B_{1\beta} + C_{1\gamma\beta} - B_{2\beta}) + \\ + \frac{1}{s}\sqrt{\frac{3}{2}}[(r - m - t + r_1) - \frac{1}{2}(n_\beta + s_\beta - l_{2\beta} - l_{1\beta})] = 0,32; \quad (2)$$

$$(Q, q) = \sqrt{3}(h_q - h_{2q}) - \frac{1}{s} \left[(b_\gamma + d_\gamma - d_{1\gamma} - d_{2\gamma}) - \right. \\ \left. - (a_\beta + \frac{1}{2}d_\beta - \frac{1}{2}d_{1\beta} - d_{2\beta} + \frac{1}{2}a_{1\beta} - \frac{1}{2}a_{2\beta}) \right] = 0,20;$$

$$(\beta_a, \beta_a) = k_\beta - \frac{1}{2}n_\beta - l_\beta + \frac{1}{2}s_\beta - p_1 + s_{1\beta} - \frac{1}{2}l_{1\beta} + \frac{1}{2}l_{2\beta} + \\ + p - p_2 = 0,77;$$

$$(\beta_a, q) = \sqrt{\frac{3}{2}}(d_\beta + d_{1\beta} - a_{2\beta} - a_{1\beta}) = 0;$$

$$(q, q) = k_q + k_1 - k_2 - k_3 = 8,63;$$

$$E_s^+ : (Q, Q) = k_Q - h_\gamma - h_{1\gamma} + h_{2\gamma} = 11,20;$$

$$(Q, \gamma) = -A_\gamma + 2C_\gamma - C_{1\gamma} + \frac{1}{2}(A_\beta + B_\beta - 2C_{\gamma\beta} - 2B_{1\beta} + \\ + C_{1\gamma\beta} + B_{2\beta}) = -0,80;$$

$$(Q, \beta_b) = \sqrt{\frac{3}{2}}(A_\beta - B_\beta - C_{1\gamma\beta} + B_{2\beta}) = 0,50;$$

$$(Q, q) = -h_q + 2h_{1q} - h_{2q} = -0,34;$$

$$(\gamma, \gamma) = k_\gamma - n_\gamma - s_\gamma + s_{1\gamma} - (2l_{\gamma\beta} - m - r - t - r_1 + 2t_1) + \\ + \frac{1}{2}(k_\beta - \frac{1}{2}n_\beta + l_\beta - p - \frac{1}{2}s_\beta - p_1 + s_{1\beta} + p_2 - \frac{1}{2}l_{1\beta} - \\ - \frac{1}{2}l_{2\beta}) = 1,50;$$

$$(\gamma, \beta_b) = \sqrt{\frac{3}{2}}[(r + t - m - r_1) + \frac{1}{2}(n_\beta - s_\beta + l_{2\beta} - l_{1\beta})] = -0,10;$$

Таблица 1
Кинематические коэффициенты и силовые постоянные естественных колебательных координат бензола и гексадегтеробензола
(см. рис. 1)

	Q_8	Q_6	Q_1	Q_2	γ_6	γ_1	γ_2	q_1	q_2	q_3	q_4	q_5	q_6
Q_5	0,481	-0,045	0	0	-0,062	0,062	0	0	0	0	0	-0,045	-0,045
γ_2					0,028	-0,168	0,280	-0,062	0,123	-0,062	0	0	0
β_4								0	0,062	-0,062	0	0	0
q_2								1,091*	1,091*	0	0	0	0
Q_5								0,603**	0,603**				
γ_2					A_γ	$C_{1\gamma}$	A_γ	h_{1q}	h_{2q}	h_{2q}	h_{1q}	h_q	h_q
β_4					s_γ	n_γ	$s_{1\gamma}$	d_γ	b_γ	d_γ	$d_{1\gamma}$	$d_{2\gamma}$	$d_{1\gamma}$
q_2								$d_{1\beta}$	d_β	a_β	$a_{1\beta}$	$a_{2\beta}$	$a_{2\beta}$
								k_1	k_q	k_1	k_2	k_3	k_2

	β_{12}	β_2	β_4	β_6	β_8	β_{10}	β_3	β_{11}	β_1	β_3	β_5	β_7
Q_5	-0,062	0	0	0	0,140	-0,078	-0,078	0,140	0	0	0	-0,062
γ_2	-0,008	-0,140	0,175	-0,028	0	0	0	-0,028	0,175	-0,140	-0,008	0
β_4	0	0,008	1,273*	0,008	0	0	0	0	0,028	-0,183	-1,134*	0
Q_5			0,785**								-0,646**	
γ_2	$C_{1\gamma\beta}$	$C_{1\gamma\beta}$	$B_{2\beta}$	$B_{1\beta}$	B_β	A_β	A_β	B_β	$B_{1\beta}$	$B_{2\beta}$	$C_{1\gamma\beta}$	$C_{\gamma\beta}$
β_4	r	$l_{\gamma\beta}$	m	t	t_1	t_1	r_1	t	m	r	r	r_1
	p_1	p	k_β	p	p_1	$l_{2\beta}$	p_2	$s_{1\beta}$	s_β	n_β	l_β	$l_{1\beta}$

* Для C_6H_6 .** Для C_6D_6 . Кинематические коэффициенты вычислены при $\epsilon_C = \frac{m'_H}{m_C} = \frac{1,088}{12} \approx 0,091$; $\epsilon_D = \frac{m'_H}{m_D} = \frac{1,088}{2,426} \approx 0,512$; $\frac{1}{s} = \frac{s_{CH}}{s_{CC}} = \frac{1,09}{1,39} = 0,784$.

$$\begin{aligned}
 (\gamma, q) &= b_\gamma - d_\gamma - d_{1\gamma} + d_{2\gamma} - \left(a_\beta - \frac{1}{2} d_\beta - \frac{1}{2} d_{1\beta} + d_{2\beta} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} a_{2\beta} - \frac{1}{2} a_{1\beta} \right) = -0,40; \\
 (\beta_b, \beta_b) &= k_\beta + \frac{1}{2} n_\beta - l_\beta - p + \frac{1}{2} s_\beta - p_1 - s_{1\beta} + p_2 + \frac{1}{2} l_{1\beta} + \\
 &\quad + \frac{1}{2} l_{2\beta} = 0,72; \\
 (\beta_b, q) &= \sqrt{\frac{3}{2}} (-d_\beta + d_{1\beta} + a_{1\beta} - a_{2\beta}) = 0; \\
 (q, q) &= k_q - k_1 - k_2 + k_3 = 8,63.
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

В формулах (2) для краткости одновременно указаны численные значения силовых постоянных (в 10^6 см⁻²), найденные путем изложенного ниже расчета.

На основании правил распадаения типов симметрии ([⁶], стр. 227) все силовые постоянные дейтеробензолов более низкой симметрии однозначно выражаются через 26 величин (2). Таким образом, для определения этих 26 величин в нашем распоряжении имеется 105 частот [⁶], и задача является вполне разрешимой.

3. Решение вековых уравнений и интерпретация колебательных спектров бензола и дейтеробензолов

Умножение матриц приведенных кинематических коэффициентов на матрицу силовых постоянных (2) позволяет получить вековые уравнения, определяющие частоты колебаний C_6H_6 и C_6D_6 . Частоты типов симметрии A_{1g} , E_u^- , E_g^+ достоверно известны из [⁴⁻⁶], и они могут быть непосредственно использованы для определения соответствующих силовых постоянных. Некоторые трудности возникают в связи с неактивными частотами A_{2g} , B_{2u} . Они были определены в [⁶] на основании правила произведений в предположении гармоничности колебаний.

Между тем при вычислении кинематических коэффициентов нами были введены «спектроскопические» массы [³] водорода $m_H = 1,088$ и дейтерия $m_D = 2,126$, служащие для некоторого упрощенного учета ангармоничности. Поэтому при подстановке частот A_{2g} и B_{2u} , вычисленных в [⁶], в вековые уравнения для C_6H_6 и C_6D_6 таковые становятся несовместимыми. Противоречие может быть разрешено лишь путем выбора некоторых оптимальных значений силовых постоянных, при которых корни вековых уравнений по необходимости несколько отличаются от значений неактивных частот, вычисленных в [⁶]. Последние, однако, в свою очередь не являются истинными, ибо колебания не являются гармоническими. Для частот B_{1u} описанная трудность не возникает, так как они вычислены в [⁶] с более значительным отклонением от правила произведений.

Подстановка опытных значений частот A_{1g} , E_u^- , E_g^+ в вековые уравнения приводит к различным наборам возможных значений силовых постоянных. Нами был применен метод вариации постоянных; для этой цели величины (2), найденные из вековых уравнений для C_6H_6 и C_6D_6 , использовались для вычисления силовых постоянных частично дейтерированных бензолов, после чего могли быть составлены вековые уравнения, определяющие частоты колебаний последних. Корни этих уравнений сопоставлялись с опытными значениями частот

Таблица 2

Наблюденные и вычисленные частоты бензола и дейтеробензолов

пор. н. п. №	C ₆ H ₆		C ₆ H ₅ D		C ₆ H ₄ D ₂		C ₆ H ₃ D ₃		C ₆ H ₂ D ₄		C ₆ D ₆	
	набл.	выч.	набл.	выч.	набл.	выч.	набл.	выч.	набл.	выч.	набл.	выч.
1	A _{1g}	992	Q* 990	A ₁	980	986	A _g	A' ₁	956	966	A _{1g}	947
2	A _{1g}	3062	q 3062	A ₁	3060	3062	A _g	A' ₁	3053	3061	A _{1g}	2292
3	E _g ⁺ I	606	γ 600	A ₁	601	605	A _g	E''II	593	574	E _g ⁺ I	571
4	E _g ⁺ I	1178	β 1170	A ₁	1176	1165	A _g	E''II	833	825	E _g ⁺ I	854
5	E _g ⁺ I	1596	Q 1589	A ₁	1591	1576	A _g	E''II	1573	1579	E _g ⁺ I	1566
6	E _g ⁺ I	3047	q 3049	A ₁	2269	2285	A _g	E''II	2292	2285	E _g ⁺ I	2265
7	B _{1u}	1010	γ 1008	A ₁	1007	993	B _{2u}	A' ₁	1003	988	B _{1u}	965
8	B _{1u}	3060	q 3059	A ₁	3055	3056	B _{2u}	A' ₁	2283	2290	B _{1u}	2289
9	E _u ⁺ II	1037	Q 1024	A ₁	1031	1020	B _{2u}	E''II	1102	1092	E _u ⁺ II	817
10	E _u ⁺ II	1485	β 1480	A ₁	1480	1479	B _{2u}	E''II	1407	1420	E _u ⁺ II	1320
11	E _u ⁺ II	3080	q 3074	A ₁	3066	3064	B _{2u}	E''II	3084	3062	E _u ⁺ II	2306
12	E _u ⁺ I	1037	Q 1024	B ₁	1076	1047	B _{3u}	E'I	1102	1092	E _u ⁺ I	817
13	E _u ⁺ I	1485	β 1480	B ₁	1450	1446	B _{3u}	E'I	1407	1420	E _u ⁺ I	1320
14	E _u ⁺ I	3080	q 3074	B ₁	3079	3075	B _{3u}	E'I	3084	3062	E _u ⁺ I	2306
15	E _g ⁺ II	606	γ 600	B ₁	603	601	B _{1g}	E'I	593	574	E _g ⁺ II	571
16	E _g ⁺ II	1178	β 1170	B ₁	1158	1141	B _{1g}	E'I	833	825	E _g ⁺ II	854
17	E _g ⁺ II	1596	Q 1589	B ₁	1574	1585	B _{1g}	E'I	1573	1579	E _g ⁺ II	1566
18	E _g ⁺ II	3047	q 3049	B ₁	3041	3049	B _{1g}	E'I	2292	2285	E _g ⁺ II	2265
19	A _{2g}	1326	β 1319	B ₁	1292	1296	B _{1g}	A' ₂	1245	1232	A _{2g}	1041
20	B _{2u}	1110	β 1099	B ₁	858	849	B _{3u}	A' ₂	920	913	B _{2u}	831
21	B _{2u}	1648	Q 1655	B ₁	1624	1642	B _{3u}	A' ₂	1600	1615	B _{2u}	1568

* Род координат симметрии.

дейтеробензолов, а затем аналогичным способом производилось испытание других наборов численных значений постоянных (2). Следует отметить, что такой процесс вариации силовых постоянных является в данном случае весьма трудоемким, так как каждый его цикл требует нового вычисления почти всех 105 частот. Нами были выполнены два таких цикла, что оказалось практически достаточным для однозначного отнесения всех частот, найденных в [4-6], к определенным типам симметрии колебаний. Найденные нами таким способом численные значения постоянных указаны в (2). Естественно, что совпадение вычисленных и наблюдаемых частот несколько хуже обычного для аналогичных расчетов частот более простых молекул; сказывается также неточность значений неактивных частот. Максимальная ошибка составляет 30 см^{-1} , а средняя абсолютная ошибка 10 см^{-1} . Результаты вычислений сведены в табл. 2, в которой для удобства в одном столбце помещены как наблюдаемые, так и вычисленные в [6] неактивные частоты. В каждой строке таблицы помещены частоты, генетически связанные между собой правилами распада типа симметрии. Такое расположение позволяет непосредственно проследить за изменением частот, вызываемым замещением H на D.

В частности, можно заметить, что за немногочисленными исключениями расчет отображает общую тенденцию частот бензолов к понижению при последовательном дейтерировании. Следует отметить, что неактивные частоты № 6, 7, 20, 21 C_6H_6 и C_6D_6 вычислялись неоднократно с различными результатами. Расчет подтверждает для этих частот значения, найденные в [6] (в пределах возможной точности, о чем сказано выше). Действительно, одновременно вычислены соответствующие этим частотам активные частоты дейтеробензолов в хорошем согласии с опытом. При других предположениях о значениях неактивных частот для активных частот тех же номеров получились бы величины, сильно отличающиеся от опытных. Кроме того, частоты № 21 $\text{C}_6\text{H}_5\text{D}$, $\text{C}_6\text{H}_4\text{D}_2$ и $\text{C}_6\text{H}_2\text{D}_4$ не были наблюдаемы в спектре указанных веществ, и для них в [6] предложены четыре ряда возможных значений, причем как наиболее вероятный предложен ряд, помещенный в табл. 2, и, следовательно, подтвержденный нашим расчетом.

Далее, интересна еще частота № 19 $\text{C}_6\text{H}_4\text{D}_2$, наблюдаемая в [6] впервые. Правильность ее определения в [6] также подтверждается нашим расчетом и, кроме того, правилом сумм [7] Свердлова, которое для частот № 15—19 имеет вид:

$$\sum \nu^2(\text{C}_6\text{H}_6) + \sum \nu^2(\text{C}_6\text{D}_6) = \sum \nu^2(\text{C}_6\text{H}_2\text{D}_4) + \sum \nu^2(\text{C}_6\text{H}_4\text{D}_2),$$

и точно выполняется.

Остановимся, наконец, еще на некоторых частотах инфракрасного спектра $\text{C}_6\text{H}_4\text{D}_2$ и $\text{C}_6\text{H}_2\text{D}_4$. Он был изучен в частности в работе [8]. Однако в этой работе линии № 7 $\text{C}_6\text{H}_4\text{D}_2$ и № 9, 11 $\text{C}_6\text{H}_2\text{D}_4$ не были обнаружены, а для остальных частот колебаний типов симметрии B_{2u} и B_{3u} получены данные, несколько отличающиеся от данных [6]. Расчет подтвердил значения частот этих трех линий. К сожалению, точность расчета не позволяет сделать выбор между значениями других частот, найденных в [6] и [8].

Из табл. 2 следует, что проблему фундаментальных частот бензола и дейтеробензолов можно считать решенной.

Полученная в настоящей работе система силовых постоянных (2) позволяет обратиться к описанию некоторых свойств силового поля бензола.

4. Силовое поле молекулы бензола

Для определения 50 силовых постоянных, характеризующих динамические взаимодействия естественных колебательных координат, мы имеем лишь 26 их комбинаций (2). Отсюда возможно только установить, что $k_1 = k_2 = k_3 = 0$ и $k_q = 8,63$.

Таким образом силовая постоянная связи C—H несколько повышена по сравнению с ее значением в предельных соединениях. Все же оказываются возможными некоторые дальнейшие выводы, вытекающие из (2). Так, например, если для силовой постоянной $h_{2\gamma}$ сделать обычное предположение, что $h_{2\gamma} = 0$, то для других силовых постоянных связей CC получаем: $k_Q = 11,36$; $h_\gamma = 1,04$; $h_{1\gamma} = -0,87$.

Таблица 3

Коэффициенты влияния бензола, соответствующие координатам симметрии (10^{-6} см²)

Тип координат	Представление группы					
	A_{1g}	B_{1u}	B_{2u}	E_u^-	E_g^+	A_{2g}
QQ	0,089	—	0,134	0,090	0,095	—
Qq	-0,007	—	—	-0,003	0,005	—
QY	—	—	—	—	0,047	—
Qβ	—	—	-0,044	-0,040	-0,058	—
YY	—	0,610	—	—	0,687	—
Yβ	—	—	—	—	0,062	—
Yq	—	0,021	—	—	0,033	—
ββ	—	—	1,234	1,131	1,401	1,481
βq	—	—	—	0,001	0,001	—
qq	0,121	0,117	—	0,116	0,114	—

Таблица 4

Коэффициенты влияния бензола, соответствующие естественным координатам (10^{-6} см²) (см. рис. 1)

$Q_5 Q_5$	0,099	$Y_5 Y_6$	0,349	$Q_5 Y_5$	-0,028
$Q_5 Q_4$	-0,008	$Y_5 Y_4$	-0,207	$Q_5 Y_4$	0,016
$Q_5 Q_3$	0,006	$Y_5 Y_3$	-0,022	$Q_5 Y_2$	0,013
$Q_5 Q_2$	-0,005	$Y_5 Y_2$	0,109		
$q_5 q_5$	0,116	$q_5 Y_5$	0,015	$Q_5 q_5$	-0,003
$q_5 q_4$	0,001	$q_5 Y_4$	-0,009	$Q_5 q_4$	0,001
$q_5 q_3$	-0,001	$q_5 Y_3$	-0,003	$Q_5 q_2$	0
$q_5 q_2$	0	$q_5 Y_2$	0,009		
$Q_5 \beta_0$	0,002	$q_5 \beta_0$	-0,007	$Y_5 \beta_9$	-0,175
$Q_5 \beta_8$	0,026	$q_5 \beta_7$	0,005	$Y_5 \beta_7$	0,097
$Q_5 \beta_7$	-0,022	$q_5 \beta_6$	0,004	$Y_5 \beta_6$	0,110
$Q_5 \beta_6$	0,006	$q_5 \beta_5$	0,001	$Y_5 \beta_5$	0,028
$Q_5 \beta_5$	0,006	$q_5 \beta_4$	0,001	$Y_5 \beta_4$	-0,006
$Q_5 \beta_4$	-0,018	$q_5 \beta_3$	-0,004	$Y_5 \beta_3$	-0,054

$\beta_7 \beta_7$	0,837	$\beta_7 \beta_2$	-0,021
$\beta_7 \beta_6$	-0,663	$\beta_7 \beta_1$	0,093
$\beta_7 \beta_5$	-0,054	$\beta_7 \beta_{12}$	-0,037
$\beta_7 \beta_4$	-0,049	$\beta_7 \beta_{10}$	-0,019
$\beta_7 \beta_3$	0,010	$\beta_7 \beta_8$	-0,053

Таким образом k_Q имеет значение, которое является промежуточным между k_Q для C_2H_6 и C_2H_4 (7 и 14) в соответствии с общепринятыми представлениями о характере связи СС в бензоле и с промежуточным значением ее длины. Вместе с тем силовые постоянные взаимодействия двух связей СС в орто- и метоположениях, т. е. h_7 и h_{17} (табл. 1), оказываются по абсолютному значению величинами одного порядка, что является отображением [факта резкого отличия взаимодействия связей СС в кольце от взаимодействия этих связей в алифатических соединениях. В последних силовая постоянная взаимодействия несоседних связей СС равна нулю. Далее, из выражений $(Q, q)_{A_{1g}}$ и $(Q, q)_{E_g^+}$ в (2) легко заключить, что $h_{1q} = 0$.

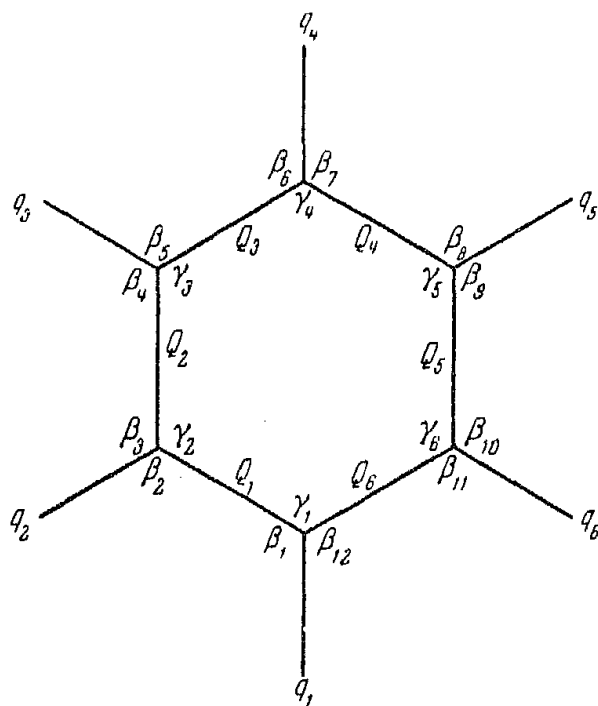


Рис. 1. Естественные колебательные координаты для плоских колебаний молекулы $C_6H_nX_{6-n}$

Тогда представляется естественным, что и $h_{2q} = 0$ и $h_q = 0,34$. Таким образом, по крайней мере в случае бензола, силовая постоянная взаимодействия связей СС и СН оказывается значительной. Между тем в случае этана она равна нулю, а в случае этилена 0,1 [3]. Ввиду сложности выражений (2) дальнейшие оценки силовых постоянных затруднительны, и более полную характеристику силового поля в бензоле можно получить на основании определения коэффициентов влияния.

Образуя из численных значений силовых постоянных (2) матрицы для каждого типа симметрии и вычисляя обратные матрицы, мы определили коэффициенты влияния, соответствующие координатам симметрии каждого неприводимого представления (табл. 3). Значения коэффициентов влияния, соответствующих координатам симметрии, исключенным при учете дополнительных соотношений, в эту таблицу не включены.

Далее, пользуясь упомянутыми обратными матрицами и линейными зависимостями между естественными координатами [3], выражая последние через координаты симметрии и пользуясь, наконец, тем важным свойством коэффициентов влияния, что они связаны между собой теми же линейными соотношениями, что и сами естественные координаты [3], мы могли найти полную систему 50 коэффициентов влияния бензола (табл. 4).

Анализ табл. 3 и 4 позволяет прийти к интересным выводам.

1. Каждый тип взаимодействия координат симметрии характеризуется вполне определенным порядком величин коэффициентов влияния.

2. Учитывая, что валентная связь или валентный угол тем прочнее, чем меньше соответствующий диагональный коэффициент влияния, мы замечаем, что связи и углы в бензоле следующим образом располагаются в порядке убывающей прочности:

$$Q > q > \gamma > \beta.$$

3. Недиагональные коэффициенты влияния до сих пор еще не получили достаточно наглядного физического истолкования. Нам представляется, что малое значение коэффициента отражает и малое взаимодействие соответствующей пары координат. Тогда из табл. 4 видно, что в бензоле взаимодействуют между собой даже достаточно удаленные координаты (за исключением CH), причем это взаимодействие носит весьма своеобразный характер (ср. рис. 1 и табл. 4): для пар координат QQ , Qq , qq , $Q\gamma$ оно обычным образом убывает по мере удаления друг от друга взаимодействующих координат. Однако для пар координат $\gamma\gamma$, $q\gamma$, $Q\beta$, $q\beta$, $\gamma\beta$, $\beta\beta$ коэффициенты влияния убывают по мере удаления, затем меняют знак и при приближении к парам положению снова значительно возрастают по абсолютной величине. Эти особенности, несомненно, в какой-то мере отображают специфику кольца как динамической системы.

5. Форма колебаний молекул бензола и гексадейтеробензола

После решения вековых уравнений по методу последовательной диагонализации представляется возможным обратиться к использова-

Таблица 5

Форма колебаний молекул бензола и гексадейтеробензола

№ частот (см. табл. 2)	C ₆ H ₆				C ₆ D ₆			
	Род координат симметрии							
	Q	γ	β	q	Q	γ	β	q
1	1	0	0	0,033	1	0	0	0,151
2	-0,077	0	0	1	-0,168	0	0	1
3,15	-0,043	1	0,263	0,022	-0,039	1	0,369	0,003
4,16	0,107	0,046	1	0,008	0,068	-0,054	1	0,098
5,17	-0,497	-0,438	1	-0,008	-0,699	-0,569	1	0,051
6,18	0,052	0,168	-0,078	1	0,057	0,315	-0,156	1
7	—	1	$\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}\gamma$	-0,010	—	1	$\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}\gamma$	-0,052
8	—	0,234	$\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}\gamma$	1	—	0,459	$\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}\gamma$	1
9,12	0,448	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	1	0,029	0,210	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	1	0,026
10,13	-0,174	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	1	-0,020	-0,308	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	1	-0,074
11,14	-0,080	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	0,100	1	-0,172	$\gamma = -\frac{1}{s}Q$	0,233	1
20	-0,282	—	1	—	-0,180	—	1	—
21	0,399	—	1	—	0,715	—	1	—

нию метода Маянца [9] с целью вычисления формы колебаний и одновременной проверки и уточнения корней вековых уравнений. Почти все частоты табл. 2 были проверены и уточнены при помощи метода Маянца. При этом первоначально форма колебаний вычислялась в координатах симметрии, а затем в естественных координатах. Мы ограничиваемся здесь лишь сообщением результатов первого расчета, полученных для C_6H_6 и C_6D_6 . Эти данные представлены в табл. 5, в которой наибольший коэффициент формы принят за единицу для каждого колебания.

Из табл. 5 вытекают следующие выводы.

1. Полносимметричные колебания A_{1g} являются чистовалентными.
2. Колебание № 7 является почти чисто деформационным.
3. Остальные колебания кольца являются деформационно-валентными.
4. Колебания № 2, 6, 8, 11, 14, 18 являются преимущественно валентными колебаниями связей $C-H$ и $C-D$.
5. В этих последних колебаниях повышается доля участия атомов кольца при переходе от C_6H_6 к C_6D_6 и, наоборот, в колебаниях, преимущественно относящихся к атомам кольца (№ 1, 7, 10, 13), участие атомов D превосходит участие атомов H.
6. Колебания № 3, 15 могут быть охарактеризованы в основном как деформационные колебания внутренних углов кольца с примесью деформации внешних углов, возрастающей при дейтерировании.
7. В табл. 2 рядом с частотами указаны соответствующие им координаты симметрии. Обычно ([3], стр. 295) соответствующий коэффициент формы является наибольшим. Однако, как видно из сопоставления табл. 2 и 5, для частот № 9, 12, 17, 21 это положение в случае бензола не соблюдается. Этим частотам соответствуют координаты симметрии рода Q , в то время как они являются преимущественно деформационными колебаниями внешних углов.

Более детальные сведения, очевидно, можно получить при рассмотрении формы колебаний в естественных координатах, причем выявляется отличие для каждой пары вырожденных колебаний. Результаты этих вычислений, однако, слишком громоздки для того, чтобы они могли быть здесь приведены.

Выполненный в настоящей работе расчет частот колебательных спектров бензола и дейтеробензолов позволяет перейти к аналогичным расчетам для алкилзамещенных бензолов и для неконденсированных полициклических соединений. Этим вопросам будут посвящены наши дальнейшие сообщения.

В работе принимали участие П. М. Подвигалкин и А. В. Хромов.

В заключение приношу благодарность Л. М. Свердлову за интерес к работе.

Саратовский государственный
университет

Поступила в редакцию
9 августа 1953 г.

Литература

- [1] Г. Герцберг. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, ИИЛ, 1949, стр. 390 и след. — [2] В. L. Crawford. а. F. A. Miller. Journ. Chem. Phys., 17, 249, 1949. — [3] М. В. Волькенштейн, М. А. Ельяшевич и Б. И. Степанов. Колебания молекул, ГТТИ, 1949. — [4] П. А. Бажулин, С. А. Ухолин, А. Л. Либерман, С. С. Новиков и Б. А. Казанский. Изв. АН СССР, ОХН, № 5, 501, 1950. — [5] C. R. Bailey, C. K. Ingold, H. G. Poole, C. L. Wilson и др. Journ. Chem. Soc., 4, 912, 1936. — [6] C. R. Bailey, C. K. Ingold, H. G. Poole, C. L. Wilson и др. Journ. Chem. Soc., 14, 222, 1946. — [7] Л. М. Свердлов. ДАН СССР, 78, 1115, 1951. — [8] F. A. Miller а. В. L. Crawford. Journ. Chem. Phys., 14, 292, 1946. — [9] Л. С. Маянец. Труды ФИАН, 5, 65, 1950.

АНИЗОТРОПИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ЦЕНТРОВ ОКРАШИВАНИЯ В КРИСТАЛЛАХ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

П. П. Феофилов

На основе классической осцилляторной модели произведен расчет азимутальной зависимости степени поляризации люминесценции центров окрашивания в кубических кристаллах. Расчет произведен для случаев ориентации элементарных осцилляторов вдоль осей симметрии четвертого, третьего и второго порядков и для возбуждения люминесценции в различных областях спектра поглощения. Сравнение расчетных и опытных данных позволяет установить характер ориентации центров окрашивания в различных исследованных случаях и высказать предположения о природе центров.

1. Введение

Недавно нами было обнаружено, что рентгенизация фторидов некоторых щелочных и щелочно-земельных металлов (LiF , NaF , CaF_2) приводит к образованию центров окрашивания, ярко люминесцирующих при возбуждении кристаллов в области возникающих полос поглощения. Люминесценция монокристаллов этих фторидов оказывается частично поляризованной при возбуждении линейно поляризованным светом и наблюдении вдоль возбуждающего луча, причем степень поляризации резко зависит от длины волны возбуждающего света и относительного расположения кристаллографических осей наблюдаемого кристалла и электрического вектора возбуждающего света [1].

Наличие значительной поляризации люминесценции свидетельствует, повидимому, о том, что люминесценция центров окрашивания в данном случае не связана с их ионизацией и последующей рекомбинацией, как это имело место в большинстве исследованных случаев, а обусловлена электронными переходами в самих центрах, причем центры следует рассматривать в отношении поглощения и излучения как анизотропные образования.

Анализ поляризационного спектра люминесценции центров окрашивания (зависимости степени поляризации люминесценции от длины волны возбуждающего света) приводит к заключению, что направления элементарных осцилляторов, описывающих поглощение и излучение, совпадают при возбуждении люминесценции в области наиболее длинноволновой полосы поглощения (поляризация положительна); при возбуждении в области более коротковолновых полос поглощения направления этих осцилляторов образуют между собой угол, достаточно близкий к прямому (поляризация отрицательна). В качестве простейшей модели люминесцирующего центра может быть принята классическая осцилляторная модель, состоящая из линейного осциллятора, определяющего излучение и длинноволновое поглощение (π -осциллятор), и круговых осцилляторов (ротаторов), расположенных в плоскости, перпендикулярной этому осциллятору, и ответственных за возникновение коротковолновых полос поглощения (σ -осцилляторы) (рис. 1). При возбуждении люминесценции длинноволновым светом направления возбуждаемых и излучающих осцилляторов совпадают, и люминесценция поляризована в той же плоскости, что и возбуждающий свет.

При коротковолновом возбуждении люминесцирующий центр поглощает составляющие возбуждающего электрического вектора, лежащие в плоскости колебаний круговых осцилляторов. Независимость спектра люминесценции от длины волны возбуждающего света заставляет считать, что в конечном счете поглощенная энергия передается тому же излучающему осциллятору, что и при длинноволновом возбуждении, т. е. осциллятору, перпендикулярному плоскости круговых осцилляторов. Очевидно, эта модель позволяет объяснить перемену знака поляризации при переходе к возбуждению в области коротковолновых полос поглощения¹.

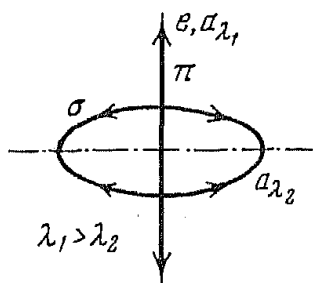


Рис. 1. Осцилляторная модель люминесцирующего центра. e — излучающий осциллятор, a_{λ_1} — осциллятор первой полосы поглощения, a_{λ_2} — осциллятор второй полосы поглощения

Кубические кристаллы исследованных фторидов оптически изотропны, поэтому для объяснения наблюдаемой азимутальной зависимости степени поляризации (так мы будем в дальнейшем называть зависимость наблюдаемой степени поляризации от угла поворота исследуемой кристаллической пластинки вокруг направления возбуждения; азимут α отсчитывается от направления электрического вектора возбуждающего света) необходимо предположить, что анизотропные центры окрашивания закономерно ориентированы внутри кристаллической решетки. Из соображений симметрии вытекает, что направления ориентации осцилляторов должны быть связаны с элементами симметрии кристаллов.

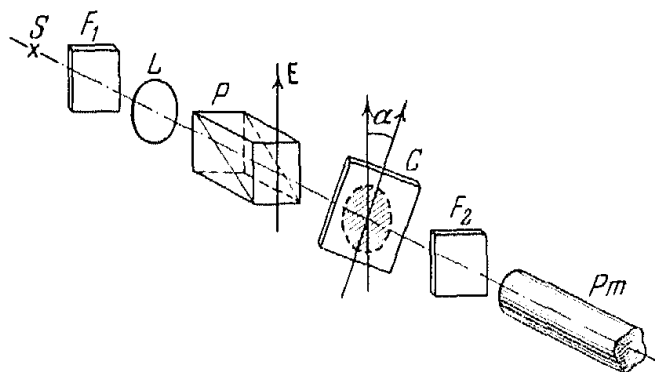
2. Расчет азимутальных зависимостей

В кристаллах кубической сингонии, в которой кристаллизуются исследованные фториды, имеются, как известно, три оси четвертого порядка ($3G_4$), четыре оси третьего порядка ($4G_3$) и шесть осей второго порядка ($6G_2$). Как указывалось в предыдущих статьях [1], наблюдаемые на опыте зависимости степени поляризации люминесценции центров окрашивания в CaF_2 , LiF и NaF от ориентации кристаллов можно объяснить, предположив, что элементарные осцилляторы центров ориентируются вдоль тех или иных кристаллографических осей. В связи с этим, воспользовавшись описанной выше осцилляторной моделью, мы произвели для трех возможных случаев ориентации осцилляторов (вдоль осей $3G_4$, $4G_3$, и $6G_2$) расчет азимутальных зависимостей наблюдаемой степени поляризации люминесценции пластинок, вырезанных из кристалла параллельно плоскостям (100), (110) и (111). Расчет произведен для условий наблюдения, иллюстрируемых рис. 2, и для возбуждения в области как длинноволновой полосы поглощения ($p > 0$), так и коротковолновых полос ($p < 0$). Концентрация центров окрашивания предполагалась малой.

¹ Можно также предположить, что при изменении длины волны возбуждающего света направление поглощающего осциллятора сохраняется, излучает же круговой осциллятор, расположенный в перпендикулярной плоскости (случай $\pi \rightarrow \sigma$). Расчет этой модели приводит к тем же формулам, что и расчет, приводимый ниже. Некоторые экспериментальные данные, которые мы предполагаем изложить в другом месте, заставляют, однако, считать более адекватной принятую модель.

Расчет производился во всех случаях по следующей схеме. Прежде всего определялись вероятности возбуждения осцилляторов, пропорциональные квадрату косинуса угла между электрическим вектором возбуждающего света и осью осциллятора. Затем находились интенсивности света I_i , посылаемого в направлении наблюдения отдельными группами осцилляторов, имеющих данную ориентацию², и степени поляризации этого света (парциальные поляризации), определяемые обычным выражением $p_i = (I_{i\parallel} - I_{i\perp}) / (I_{i\parallel} + I_{i\perp})$, после чего по фор-

Рис. 2. Схема наблюдений. S — источник возбуждения, F_1, F_2 — светофильтры, L — линза, P — поляризатор, C — исследуемый кристалл, Pm — поляриметр



муле сложения поляризаций вычислялась поляризация суммарного излучения в направлении наблюдения

$$p = \frac{\sum p_i I_i}{\sum I_i},$$

где суммирование ведется по группам осцилляторов, имеющих одинаковую ориентацию.

1. Осцилляторы расположены вдоль осей G_4

Три взаимно перпендикулярные оси четвертого порядка направлены параллельно ребрам куба (рис. 3). Вдоль этих направлений расположены три группы линейных осцилляторов, описывающих излучение и длинноволновое поглощение. Все три группы имеют одинаковый статистический вес, т. е. осцилляторы распределены равномерно по всем трем направлениям.

1. Положительная поляризация («длинноволновое» возбуждение)

а) Пластика вырезана из кристалла параллельно плоскости (100), т. е. параллельно грани куба (рис. 3, а):

$$I_1 = \cos^2 \alpha, \quad I_2 = \sin^2 \alpha, \quad I_3 = 0;$$

$$\sum I = 1 = \text{const}(\alpha); \quad (1)$$

$$p_1 = \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha = \cos 2\alpha, \quad p_2 = \sin^2 \alpha - \cos^2 \alpha = -\cos 2\alpha,$$

$$p = \cos^2 2\alpha. \quad (2)$$

б) Пластика вырезана из кристалла параллельно плоскости (110), т. е. параллельно грани ромбододекаэдра (рис. 3, б):

² Вероятности возбуждения и интенсивности света, излучаемого отдельными группами осцилляторов, нормировались к единице.

$$I_1 = \cos^2 \alpha, \quad I_2 = I_3 = \cos^2 \frac{\pi}{4} \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\pi}{4} = 1/4 \sin^2 \alpha;$$

$$\sum I = 1/2 (1 + \cos^2 \alpha); \quad (3)$$

$$p_1 = \cos 2\alpha, \quad p_2 = p_3 = -\cos 2\alpha,$$

$$p = \cos 2\alpha (3 \cos^2 \alpha - 1) / (\cos^2 \alpha + 1). \quad (4)$$

в) Пластика вырезана параллельно плоскости (111), т. е. параллельно грани октаэдра (рис. 3, в):

$$I_1 = \cos^2 \alpha \cos^2 \varphi, \quad I_2 = \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3} + \alpha \right) \cos^2 \varphi =$$

$$= 1/4 (\cos^2 \alpha + 2\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha + 3 \sin^2 \alpha) \cos^2 \varphi;$$

$$I_3 = \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3} - \alpha \right) \cos^2 \varphi = 1/4 (\cos^2 \alpha - 2\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha + 3 \sin^2 \alpha) \cos^2 \varphi,$$

где φ — угол, образуемый осцилляторами с плоскостью (111):

$$\varphi = \arctg(1/\sqrt{2}), \quad \cos^2 \varphi = 2/3,$$

$$\sum I = 1 = \text{const}(\alpha); \quad (5)$$

$$p_1 = \cos 2\alpha, \quad p_2 = \cos 2 \left(\frac{2\pi}{3} + \alpha \right) = -1/2 (\cos 2\alpha - \sqrt{3} \sin 2\alpha),$$

$$p_3 = -1/2 (\cos 2\alpha + \sqrt{3} \sin 2\alpha);$$

$$p = 1/2. \quad (6)$$

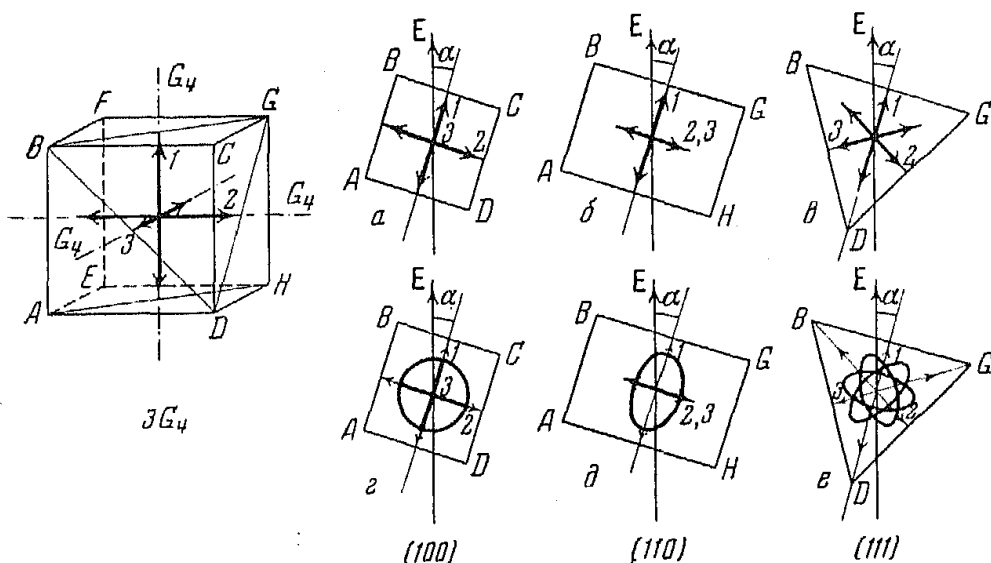


Рис. 3. Пространственное расположение осцилляторов при их ориентации по осям симметрии четвертого порядка

2. Отрицательная поляризация («коротковолновое» возбуждение)

При возбуждении люминесценции в области коротковолновых полос поглощения центров окрашивания поляризация излучаемого света меняет знак: плоскость преимущественных колебаний в свете люминесценции перпендикулярна возбуждающему электрическому вектору. В принятой нами классической модели осцилляторов это соответствует

возбуждению колебаний круговых осцилляторов, расположенных в плоскости, перпендикулярной излучающему осциллятору. Парциальные поляризации p_i люминесценции, излучаемой отдельными группами осцилляторов, будут, очевидно, иметь те же значения, что и в случае положительной поляризации.

г) Пластика вырезана параллельно плоскости (100) (рис. 3, г):

$$I_1 = \sin^2 \alpha, \quad I_2 = \cos^2 \alpha, \quad I_3 = 0;$$

$$\sum I = 1 = \text{const}(\alpha); \quad (7)$$

$$p = -\cos^2 2\alpha. \quad (8)$$

д) Пластика вырезана параллельно плоскости (110) (рис. 3, д).

Круговые осцилляторы 1 проектируются на плоскость пластики в виде прямых линий; круговые осцилляторы 2 и 3 — в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \cos \frac{\pi}{4} = 1 : 1/\sqrt{2}$:

$$I_1 = \sin^2 \alpha; \quad I_2 = I_3 = \left[\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\pi}{4} \right] \cos^2 \frac{\pi}{4} = 1/4 (1 + \cos^2 \alpha);$$

$$\sum I = (3 - \cos^2 \alpha) / 2, \quad (9)$$

$$p = -\cos 2\alpha (3 \cos^2 \alpha - 1) / (3 - \cos^2 \alpha). \quad (10)$$

е) Пластика вырезана параллельно плоскости (111) (рис. 3, е).

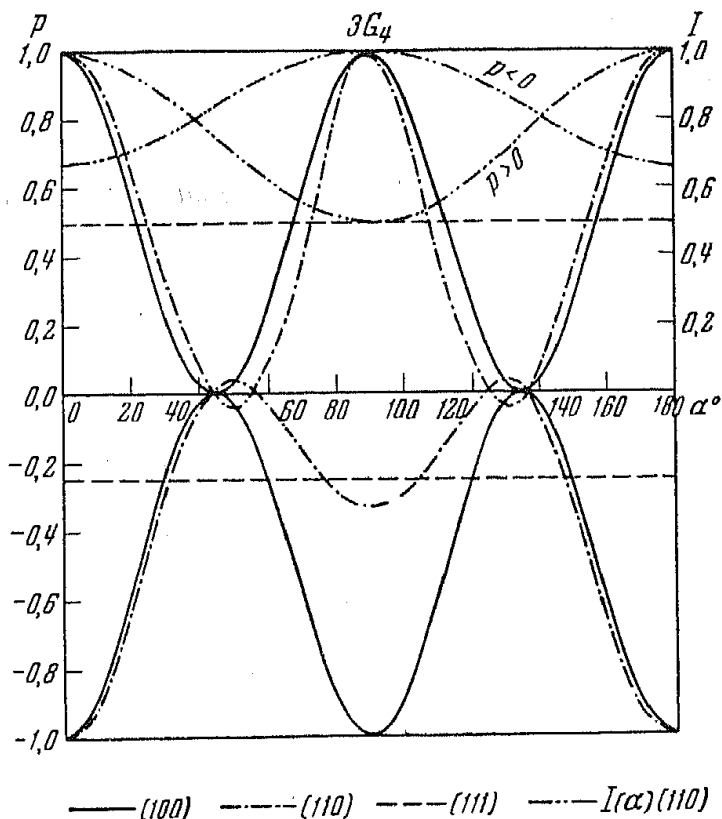


Рис. 4. Азимутальные зависимости поляризации люминесценции при ориентации осцилляторов по осям четвертого порядка

Круговые осцилляторы проектируются на плоскость (111) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \sin \varphi$, где φ , как и в случае в), — угол, равный $\arctg(1/\sqrt{2})$:

$$I_1 = (\cos^2 \alpha \sin^2 \varphi + \sin^2 \alpha) \cos^2 \varphi = \frac{2}{9} (1 + 2 \sin^2 \alpha);$$

$$I_2 = \frac{1}{3} + \frac{2}{9} (\cos^2 \alpha - \sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha); \quad I_3 = \frac{1}{3} + \frac{2}{9} (\cos^2 \alpha + \sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha);$$

$$\sum I = \frac{4}{9} = \text{const}(\alpha); \quad (11)$$

$$p = -\frac{1}{4}. \quad (12)$$

Зависимости, выражаемые формулами (1) — (12), изображены графически на рис. 4. Обращает на себя внимание азимутальная зависимость интенсивности люминесценции при возбуждении пластинок, вырезанных параллельно плоскости (110) [формулы (3) и (9)].

II. Осцилляторы расположены вдоль осей $4C_3$

Четыре оси третьего порядка направлены по диагоналям куба (перпендикулярно граням октаэдра) (рис. 5).

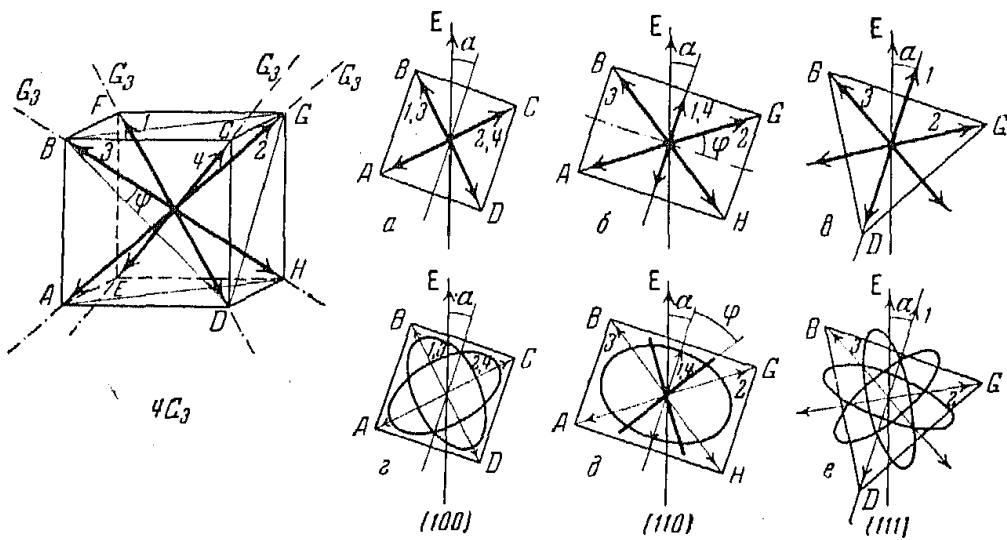


Рис. 5. Пространственное расположение осцилляторов при их ориентации по осям симметрии третьего порядка

1. Положительная поляризация («длинноволновое» возбуждение)

а) Пластика вырезана параллельно плоскости (100) (рис. 5, а):

$$I_1 = I_3 = \cos^2 \varphi \cos^2 \left(\frac{\pi}{4} - \alpha \right) \cos^2 \varphi = \frac{2}{9} (1 + \sin 2\alpha),$$

$$I_2 = I_4 = \frac{2}{9} (1 - \sin 2\alpha);$$

$$\sum I = \frac{8}{9} = \text{const}(\alpha); \quad (13)$$

$$p_1 = \sin 2\alpha, \quad p_2 = -\sin 2\alpha,$$

$$p = \sin^2 2\alpha. \quad (14)$$

б) Пластика вырезана параллельно плоскости (110) (рис. 5, б):

$$I_1 = I_4 = \sin^2 \varphi \cos^2 \alpha \sin^2 \varphi = \frac{1}{9} \cos^2 \alpha, \quad I_2 = \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} - \varphi + \alpha \right) =$$

$$= \frac{1}{3} (1 + \sin^2 \alpha - 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha); \quad I_3 = \frac{1}{3} (1 + \sin^2 \alpha + 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha);$$

$$\sum I = \frac{4}{9} (2 + \sin^2 \alpha); \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
 p_1 &= p_4 = \cos 2\alpha, \quad p_2 = -1/3(\cos 2\alpha + 2\sqrt{2}\sin 2\alpha), \\
 p_3 &= -1/3(\cos 2\alpha - 2\sqrt{2}\sin 2\alpha); \\
 p &= \sin^2 \alpha (7 - 6\sin^2 \alpha) / (2 + \sin^2 \alpha).
 \end{aligned} \quad (16)$$

в) Пластика вырезана параллельно плоскости (111) (рис. 5, в). В этом случае осцилляторы одной из групп перпендикулярны плоскости пластики и могут не рассматриваться. Остальные три группы осцилляторов образуют с плоскостью (111) углы $\psi = \arctg(1/2\sqrt{2})$:

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \cos^2 \psi \cos^2 \alpha \cos^2 \psi = {}^{64}/_{81} \cos^2 \alpha, \quad I_2 = {}^{64}/_{81} \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3} + \alpha \right) = \\
 &= {}^{16}/_{81} (\cos^2 \alpha + 2\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha + 3 \sin^2 \alpha), \\
 I_3 &= {}^{16}/_{81} (\cos^2 \alpha - 2\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha + 3 \sin^2 \alpha); \\
 \sum I &= {}^{32}/_{27} = \text{const}(\alpha);
 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned}
 p_1 &= \cos 2\alpha, \quad p_2 = -1/2(\cos 2\alpha - \sqrt{3} \sin 2\alpha), \quad p_3 = -1/2(\cos 2\alpha + \sqrt{3} \sin 2\alpha); \\
 p &= 1/2.
 \end{aligned} \quad (18)$$

2. Отрицательная поляризация («коротковолновое» возбуждение)

г) Пластика вырезана параллельно плоскости (100) (рис. 5, г).

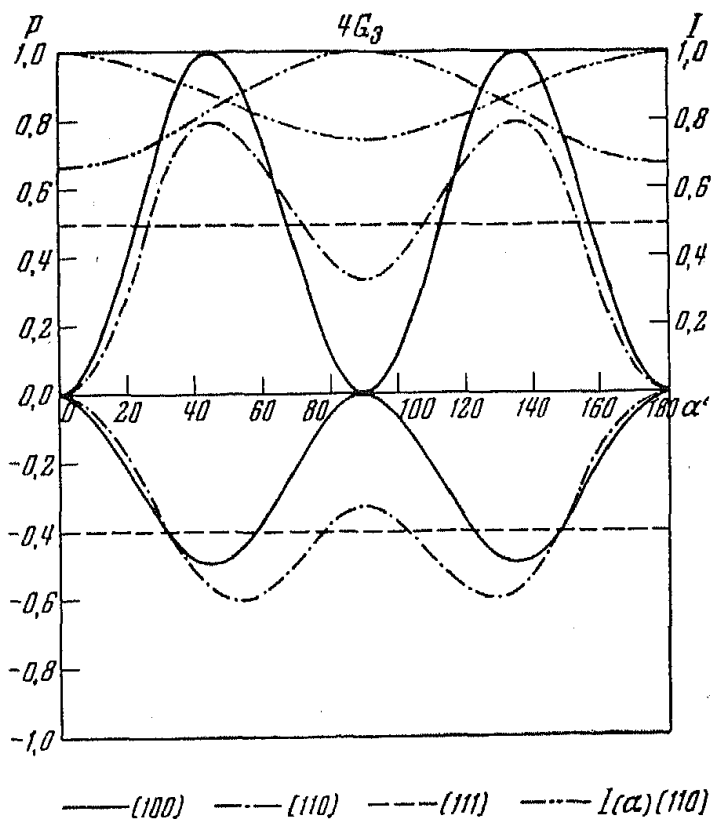


Рис. 6. Азимутальные зависимости поляризации люминесценции при ориентации осцилляторов по осям третьего порядка. Для $I(\alpha)$ (110) кривая, обращенная выпуклостью вверх, соответствует $p > 0$, а обращенная выпуклостью вниз, — случаю $p < 0$.

Круговые осцилляторы проектируются на плоскость (100) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \sin \varphi = 1 : \sqrt{3}$:

$$I_1 = I_3 = \left[\cos^2 \left(\frac{\pi}{4} + \alpha \right) + \sin^2 \varphi \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} + \alpha \right) \right] \cos^2 \varphi = 4/9 (1 - \cos \alpha \sin \alpha);$$

$$I_2 = I_4 = 4/9 (1 + \cos \alpha \sin \alpha);$$

$$\sum I = 16/9 = \text{const}(\alpha). \quad (19)$$

Парциальные поляризации p_i имеют те же значения, что и в случае II, 1, а:

$$p = -1/2 \sin^2 2\alpha. \quad (20)$$

д) Пластика вырезана параллельно плоскости (110) (рис. 5, д).

Круговые колебания групп осцилляторов 2 и 3 можно рассматривать как линейные, перпендикулярные излучающим осцилляторам; круговые осцилляторы 1 и 4 проектируются на плоскость (110) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \cos \varphi = 1 : \sqrt{2/3}$:

$$I_1 = I_4 = (\cos^2 \varphi \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha) \sin^2 \varphi = 1/9 (2 + \sin^2 \alpha), \quad I_2 = \cos^2 (\varphi - \alpha) =$$

$$= 1/3 (1 + 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha + \cos^2 \alpha), \quad I_3 = 1/3 (1 - 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha + \cos^2 \alpha);$$

$$\sum I = 4/9 (4 - \sin^2 \alpha). \quad (21)$$

Парциальные поляризации имеют те же значения, что и в случае II, 1, б):

$$p = -\sin^2 \alpha (7 - 6 \sin^2 \alpha) / (4 - \sin^2 \alpha). \quad (22)$$

е) Пластика вырезана параллельно плоскости (111) (рис. 5, е).

Круговые осцилляторы 1, 2 и 3 проектируются на плоскость (111) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \sin \psi = 1 : 1/3$:

$$I_1 = (\sin^2 \psi \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha) \cos^2 \psi = 8/81 (1 + 8 \sin^2 \alpha);$$

$$I_2 = 8/81 (3 + 4 \cos^2 \alpha - 4\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha),$$

$$I_3 = 8/81 (3 + 4 \cos^2 \alpha + 4\sqrt{3} \cos \alpha \sin \alpha), \quad I_4 = 0;$$

$$\sum I = 40/27 = \text{const}(\alpha); \quad (23)$$

$$p = -2/5. \quad (24)$$

Зависимости, выражаемые формулами (13) — (24), изображены графически на рис. 6. Здесь, так же как и в случае I, имеет место азимутальная зависимость интенсивности люминесценции, возбуждаемой в пластинках, вырезанных параллельно плоскости (110).

III. Осцилляторы расположены вдоль осей $6G_2$

Шесть осей второго порядка проходят через середины ребер куба (перпендикулярно граням ромбододекаэдра) (рис. 7).

1. Положительная поляризация («длинноволновое» возбуждение)

а) Пластика вырезана параллельно плоскости (100) (рис. 7, а):

$$I_1 = \cos^2 \left(\frac{\pi}{4} + \alpha \right) = 1/2 (1 - \sin 2\alpha), \quad I_2 = I_4 = 1/4 \cos^2 \alpha,$$

$$I_3 = 1/2 (1 + \sin 2\alpha), \quad I_5 = I_6 = 1/4 \sin^2 \alpha;$$

$$\sum I = 3/2 = \text{const}(\alpha); \quad (25)$$

$$p_1 = -\sin 2\alpha, \quad p_2 = p_4 = \cos 2\alpha, \quad p_3 = \sin 2\alpha, \quad p_5 = p_6 = -\cos 2\alpha; \\ p = 1/3(1 + \sin^2 2\alpha). \quad (26)$$

б) Пластика вырезана параллельно плоскости (110) (рис. 7, б):

$$I_1 = I_4 = \cos^2 \frac{\pi}{6} \cos^2(\varphi + \alpha) \cos^2 \frac{\pi}{6} = 3/16(1 + \cos^2 \alpha - 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha),$$

$$I_2 = I_3 = 3/16(1 + \cos^2 \alpha + 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha), \quad I_5 = \sin^2 \alpha, \quad I_6 = 0;$$

$$\sum I = 1/4(6 + \sin^2 \alpha); \quad (27)$$

$$p_1 = p_4 = 1/3(\cos 2\alpha - 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \quad p_2 = p_3 = 1/3(\cos 2\alpha + 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \\ p_5 = -\cos 2\alpha;$$

$$p = (2 + 7 \sin^2 \alpha - 6 \sin^4 \alpha) / (6 + \sin^2 \alpha). \quad (28)$$

в) Пластика вырезана параллельно плоскости (111) (рис. 7, в).

Нетрудно убедиться, что, так же как в случаях I, 1, в) и II, 1, в),

$$\sum I = \text{const}(\alpha); \quad (29)$$

$$p = 1/2. \quad (30)$$

2. Отрицательная поляризация («коротковолновое» возбуждение)

г) Пластика вырезана параллельно плоскости (100) (рис. 7, г).

Колебания круговых осцилляторов I и 3 можно рассматривать как линейные, перпендикулярные излучающим осцилляторам; круговые

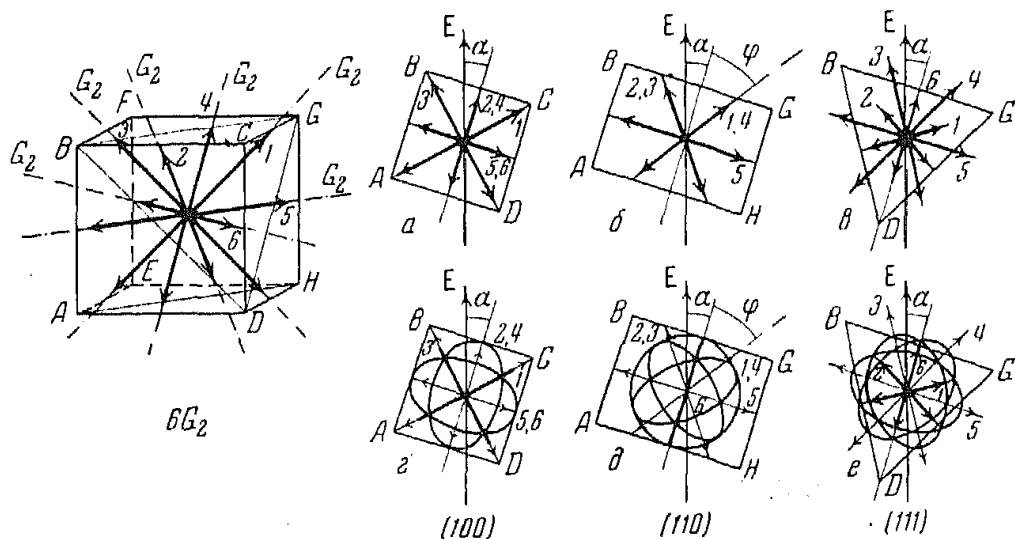


Рис. 7. Пространственное расположение осцилляторов при их ориентации по осям симметрии второго порядка

осцилляторы 2, 4, 5 и 6 проектируются на плоскость (100) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \cos \frac{\pi}{4} = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}}$:

$$I_1 = \cos^2\left(\frac{\pi}{4} - \alpha\right) = 1/2(1 + \sin 2\alpha), \quad I_3 = 1/2(1 - \sin 2\alpha), \quad I_2 = I_4 = \\ = \left(\cos^2 \frac{\pi}{4} \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha\right) \cos^2 \frac{\pi}{4} = 1/4(1 + \sin^2 \alpha), \quad I_5 = I_6 = 1/4(1 + \cos^2 \alpha); \\ \sum I = 5/2 = \text{const}(\alpha). \quad (31)$$

Парциальные поляризации имеют те же значения, что и в случае III, 1, а):

$$p = -\frac{1}{5}(1 + \sin^2 2\alpha). \quad (32)$$

д) Пластика вырезана параллельно плоскости (110) (рис. 7, д).

Круговые осцилляторы 1, 2, 3, 4 проектируются на плоскость (110) в виде эллипсов с отношением осей, равным $1 : \sin \frac{\pi}{6} = 1 : \frac{1}{2}$; круговые осцилляторы 5 проектируются в виде линии:

$$I_1 = I_4 = \left[\sin^2 \frac{\pi}{6} \cos^2(\varphi + \alpha) + \sin^2(\varphi + \alpha) \right] \cos^2 \frac{\pi}{6} = \\ = \frac{3}{16}(2 + \sin^2 \alpha + 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha),$$

$$I_2 = I_3 = \frac{3}{16}(2 + \sin^2 \alpha - 2\sqrt{2} \sin \alpha \cos \alpha), \quad I_5 = \cos^2 \alpha, \quad I_6 = 0;$$

$$\sum I = (10 - \sin^2 \alpha) / 4. \quad (33)$$

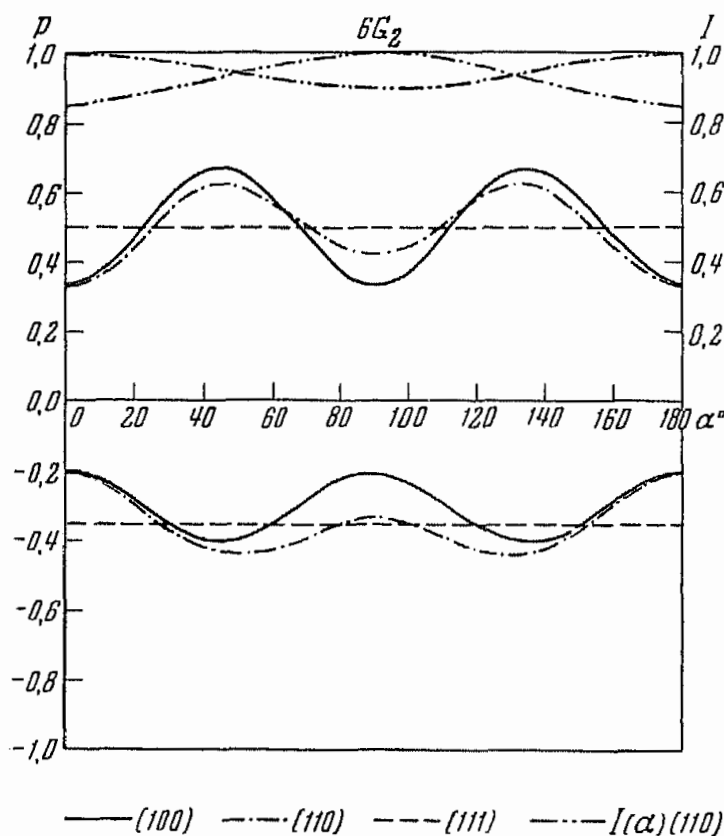


Рис. 8. Азимутальные зависимости поляризации люминесценции при ориентации осцилляторов по осям второго порядка. Для $I(\alpha)$ (110) кривая, обращенная выпуклостью вверх, соответствует $p > 0$, а обращенная выпуклостью вниз — случаю $p < 0$

Парциальные поляризации имеют те же значения, что и в случае III, 1, б):

$$p = -(2 + 7 \sin^2 \alpha - 6 \sin^4 \alpha) / (10 - \sin^2 \alpha). \quad (34)$$

е) Пластика вырезана параллельно плоскости (111) (рис. 7, е).

Рассматривая отдельно группы осцилляторов 1, 2, 6 и 3, 4, 5, можно убедиться, что

$$\sum_{1,2,6} I = 5/6; \quad \sum_{3,4,5} I = 3/2;$$

$$\sum I = 7/3 = \text{const}(\alpha). \quad (35)$$

$$p_{1,2,6} = 1/45, \quad p_{3,4,5} = -1/2, \\ p = -5/14. \quad (36)$$

Зависимости, выражаемые формулами (25)–(36), изображены графически на рис. 8. Как можно видеть из этого рисунка, в случае расположения осцилляторов вдоль осей $6G_2$ азимутальные зависимости выражены менее резко, чем в случаях I и II, что соответствует приближению к случаю полной изотропии распределения осцилляторов (изотропные растворы), в котором, как известно, $p = \text{const}(\alpha) = 1/2$ (или $-1/3$ при перпендикулярном расположении поглощающих и излучающих осцилляторов) [2].

3. «Спонтанная» поляризация люминесценции пластинок, вырезанных параллельно плоскости (110)

Плоскость (110) проходит через кристалл перпендикулярно оси симметрии второго порядка. Вследствие этого при возбуждении люминесценции естественным светом, падающим на пластинку, вырезанную параллельно этой плоскости, интенсивности двух взаимно перпендикулярно поляризованных составляющих люминесценции оказываются в общем случае различными, т. е. люминесценция оказывается частично поляризованной. Нетрудно вычислить степень этой так называемой «спонтанной» поляризации, наблюдаемой при возбуждении люминесценции естественным светом в направлении возбуждающего луча, за счет анизотропного распределения осцилляторов в плоскости, перпендикулярной этому направлению [2].

I. Ориентация вдоль осей $3G_1$

1. «Длинноволновое» возбуждение. Направления поглощающих и излучающих осцилляторов совпадают:

$$I_1 = 1, \quad I_2 = I_3 = \cos^4 \frac{\pi}{4} = 1/4, \quad \sum I = 3/2 = \text{const}(\alpha); \\ p_1 = \cos 2\alpha, \quad p_2 = p_3 = -\cos 2\alpha; \\ p = 1/3 \cos 2\alpha. \quad (37)$$

2. «Коротковолновое» возбуждение. Излучающие осцилляторы перпендикулярны поглощающим:

$$I_1 = 1, \quad I_2 = I_3 = \left(1 + \cos^2 \frac{\pi}{4}\right) \cos^2 \frac{\pi}{4} = 3/4, \quad \sum I = 5/2 = \text{const}(\alpha); \\ p = -1/5 \cos 2\alpha. \quad (38)$$

II. Ориентация вдоль осей $4G_2$

1. «Длинноволновое» возбуждение:

$$I_1 = I_4 = \sin^4 \varphi = 1/9, \quad I_2 = I_3 = 1, \quad \sum I = 20/9 = \text{const}(\alpha); \\ p_1 = p_4 = \cos 2\alpha, \quad p_2 = -1/3 (\cos 2\alpha + 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \\ p_3 = -1/3 (\cos 2\alpha - 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \\ p = -1/5 \cos 2\alpha. \quad (39)$$

2. «Коротковолновое» возбуждение:

$$I_1 = I_4 = (1 + \cos^2 \varphi) \sin^2 \varphi = 5/9, \quad I_2 = I_3 = 1, \quad \sum I = 28/9 = \text{const}(\alpha), \\ p = 1/7 \cos 2\alpha. \quad (40)$$

III. Ориентация осей $6G_2$

1. «Длинноволновое» возбуждение:

$$I_1 = I_2 = I_3 = I_4 = \cos^4 \frac{\pi}{6} = 9/16, \quad I_5 = 1, \quad I_6 = 0, \quad \sum I = 13/4 = \text{const}(\alpha); \\ p_1 = p_4 = 1/3 (\cos 2\alpha - 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \quad p_2 = p_3 = 1/3 (\cos 2\alpha + 2\sqrt{2} \sin 2\alpha), \\ p_5 = -\cos 2\alpha; \\ p = -1/13 \cos 2\alpha. \quad (41)$$

2. «Коротковолновое» возбуждение:

$$I_1 = I_2 = I_3 = I_4 = \left(1 + \sin^2 \frac{\pi}{6}\right) \cos^2 \frac{\pi}{6} = 15/16, \quad I_5 = 1, \quad I_6 = 0, \\ \sum I = 19/4 = \text{const}(\alpha); \\ p = 1/19 \cos 2\alpha. \quad (42)$$

Естественно, что абсолютные значения спонтанной поляризации уменьшаются по мере приближения к изотропному расположению осцилляторов.

В табл. 1 дана сводка результатов расчета [формулы (1)–(42)].

4. О степени анизотропии люминесцирующих центров окрашивания

Сравнение экспериментальных зависимостей, полученных для окрашенных кристаллов CaF_2 , LiF и NaF [1], с расчетными зависимостями, изображенными графически на рис. 4, 6 и 8, показывает, что в случае CaF_2 осцилляторы ориентируются вдоль осей $3G_4$, а в случае LiF и NaF — вдоль осей $6G_2$. Характер азимутальной зависимости степени поляризации, наблюдаемый на опыте, в точности соответствует расчетному. Абсолютные значения степени поляризации оказываются близкими к вычисленным в предположении полной анизотропии излучателей, что свидетельствует о высокой степени анизотропии элементарных излучателей центров окрашивания.

Для характеристики анизотропии элементарных излучателей можно ввести фактор анизотропии, определяемый как отношение вероятности поглощения (или излучения) колебаний, перпендикулярных оси осциллятора, к вероятности поглощения (излучения) колебаний вдоль оси осциллятора. Если обозначить эту величину через β , то можно показать, что при «длинноволновом» возбуждении пластинок, параллельных (100),

$$p = p_0 \frac{(1 - \beta)^2}{(1 + \beta)^2 + 2\beta^2} \quad (43)$$

(при ориентации по осям $3G_4$) и

$$p = p_0 \frac{3(1 - \beta)^2}{3 + 10\beta + 11\beta^2} \quad (44)$$

(при ориентации по осям $6G_2$), где p_0 — значение поляризации, вычисленное в предположении полной анизотропии излучателей ($\beta = 0$).

Таблица 1

Ориентация осцилляторов	Плоскость, параллельно которой вырезана пластинка	$p(\alpha)$		$I(\alpha)$	
		Возбуждение в первой полосе	Возбуждение во второй полосе	Возбуждение в первой полосе	Возбуждение во второй полосе
$3G_4$	(100)	$\cos^2 2\alpha$	$-\cos^2 2\alpha$	1	1
	(110)	$\cos 2\alpha \frac{3\cos^2 \alpha - 1}{\cos^2 \alpha + 1}$	$-\cos 2\alpha \frac{3\cos^2 \alpha - 1}{3 - \cos^2 \alpha}$	$\frac{1 + \cos^2 \alpha}{2}$	$\frac{3 - \cos^2 \alpha}{3}$
	(111)	$1/2$	$-1/4$	1	1
$4G_3$	(100)	$\sin^2 2\alpha$	$-\frac{1}{2} \sin^2 2\alpha$	1	1
	(110)	$\sin^2 \alpha \frac{7 - 6\sin^2 \alpha}{2 + \sin^2 \alpha}$	$-\sin^2 \alpha \frac{7 - 6\sin^2 \alpha}{4 - \sin^2 \alpha}$	$\frac{2 + \sin^2 \alpha}{3}$	$\frac{4 - \sin^2 \alpha}{4}$
	(111)	$1/2$	$-2/5$	1	1
$6G_2$	(100)	$\frac{1 + \sin^2 2\alpha}{3}$	$-\frac{1 + \sin^2 2\alpha}{5}$	1	1
	(110)	$\frac{2 + 7\sin^2 \alpha - 6\sin^4 \alpha}{6 + \sin^2 \alpha}$	$-\frac{2 + 7\sin^2 \alpha - 6\sin^4 \alpha}{10 - \sin^2 \alpha}$	$\frac{6 + \sin^2 \alpha}{7}$	$\frac{10 - \sin^2 \alpha}{10}$
	(111)	$1/2$	$-5/14$	1	1
«Спонтанная» поляризация					
$3G_4$	(110)	$\frac{\cos 2\alpha}{3}$	$-\frac{\cos 2\alpha}{5}$	1	1
$4G_3$	(110)	$-\frac{\cos 2\alpha}{5}$	$\frac{\cos 2\alpha}{7}$	1	1
$6G_2$	(110)	$-\frac{\cos 2\alpha}{13}$	$\frac{\cos 2\alpha}{19}$	1	1

При наблюдаемых отклонениях p от p_0 , равных примерно 10%, $\beta \approx 0,02-0,03$ у CaF_2 и LiF ; $\beta \approx 0,1$ у NaF . Малость значений β показывает, что элементарные излучатели центров окрашивания в исследованных кристаллах можно рассматривать как почти полностью анизотропные.

5. О природе люминесцирующих центров окрашивания

Рассматривая различные возможные случаи ориентации осцилляторов относительно осей симметрии кристаллов, мы не делали никаких предположений о природе центров окрашивания. Высокая степень анизотропии излучения, наблюдаемая на опыте, позволяет высказать некоторые предположения относительно характера электронных уровней центров. Как известно, степень поляризации излучения, сопровождающего переход между двумя энергетическими уровнями, определяется относительной интенсивностью π - и σ -переходов, т. е. переходов, в которых магнитное квантовое

число M изменяется соответственно на 0 или ± 1 . Нетрудно показать, вычисляя эти интенсивности при люминесценции, определяемой переходами между энергетическими уровнями с различными значениями внутреннего квантового числа J (мы рассматриваем случай резонансной люминесценции, соответствующий в нашем случае «длинноволновому» возбуждению), что значения степени поляризации, близкие к единице, могут наблюдаться в одном и только одном случае — когда в основном состоянии центра $J=0$, а в первом возбужденном $J=1^3$. Таким образом состояния центров характеризуются нулевым или целочисленным спином, что свидетельствует о том, что центры окрашивания представляют собой системы с четным числом электронов. Естественнo предположить, что основным состоянием центра является состояние 1S_0 , а первым возбужденным — 1P_1 . В связи с этим отпадает возможность рассматривать центры окрашивания в исследованных случаях как F -центры в обычном понимании, т. е. как электроны, локализовавшиеся в вакантных анионных узлах (модель де-Бура). В этом случае, очевидно, квантовое число J было бы полуцелым, так как спин был бы равен $1/2$. Центры окрашивания в исследованных

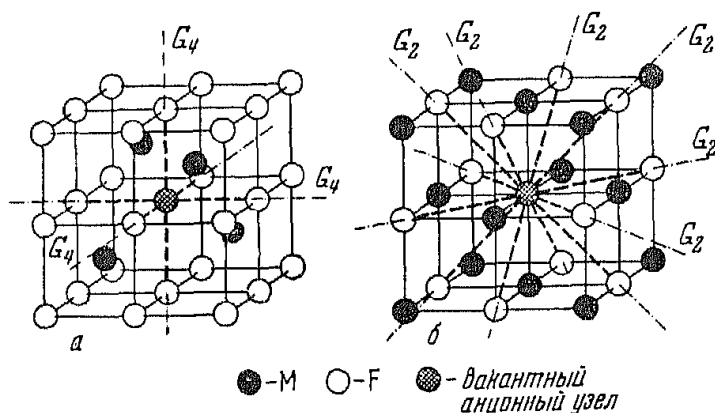


Рис. 9. Структура кристаллических решеток: а — CaF_2 и б — фторидов щелочных металлов

фторидах не могут также рассматриваться как сверхстехиометрические атомы металла, сохраняющие систему своих электронных уровней, поскольку в этом случае степень анизотропии осцилляторов двухвалентных металлов (основное состояние 1S_0) и одновалентных (основное состояние $^2S_{1/2}$) должна быть существенно различной. В то же время она практически одинакова в случае CaF_2 и LiF .

Представляется весьма правдоподобным, что центры окрашивания в рассматриваемых случаях являются F_2 -центрами, т. е. системами из двух F -центров, находящихся в соседних анионных узлах. Вероятность такой ассоциации F -центров была рассмотрена недавно Дейгеном [4]. Представление об F_2 -центрах является до некоторой степени конкретизацией известных представлений об F' -центрах, т. е. F -центрах, присоединивших к себе по одному электрону. Спины электронов в таких сложных системах антипараллельны, так что суммарный спин равен нулю [5].

Предположение о том, что люминесцирующие центры окрашивания в изучавшихся кристаллах фторидов представляют собой F_2 -центры, т. е. пары электронов, расположенных в соседних вакантных анионных узлах, находится в полном согласии с данными, полученными при исследовании пространственной анизотропии излучения [1]. В са-

³ Частные примеры таких вычислений можно найти в [3]. Нами такой расчет был произведен для $0 \leq J \leq 4$ при $\Delta J = 0, \pm 1$.

мом деле, ориентация F_2 -центров в кристаллической решетке должна определяться направлениями от данного анионного узла к соседним, т. е. координацией аниона анионами. В случае CaF_2 каждый анион окружен шестью другими анионами (рис. 9,а), т. е. имеются три взаимноперпендикулярных направления, в которых могут ориентироваться F_2 -центры. В случае фторидов щелочных металлов соответствующее координационное число равно двенадцати, т. е. имеется шесть возможных направлений ориентации (рис. 9,б). Нетрудно убедиться, что эти направления совпадают у CaF_2 с осями симметрии четвертого порядка, а у щелочно-галогидных кристаллов — с осями второго порядка, как это следует и из поляризационных опытов.

Если, руководствуясь этими соображениями, искать кристаллические структуры, в которых реализовался бы случай II, т. е. осцилляторы центров окрашивания ориентировались бы по осям симметрии третьего порядка, то нетрудно убедиться, что среди галогидных соединений (и вообще среди соединений с одновалентными анионами) такие структуры невозможны. Требуемое координационное число (8 анионов, окружающих данный анионный узел) имеет место у некоторых окислов (структуры типа Cu_2O или Ag_2O).

Представления о сложном характере центров окраски, изученных в [1], полностью согласуются также с устойчивостью ориентации центров. Равномерное распределение их по возможным направлениям ориентации есть результат статистического усреднения. Каждый данный центр оказывается устойчиво ориентированным в некотором направлении, как это следует из наших опытов, в которых было обнаружено анизотропное фотохимическое выцветание центров окрашивания (аналог известного явления Вейгерта). Фотохимически активный поляризованный свет может вызвать разрушение центров, имеющих определенную ориентацию, в результате чего распределение центров может утратить свою симметрию. Результаты этих опытов, которые, в частности, позволяют сделать однозначный выбор между двумя осцилляторными моделями, упомянутыми в разделе 1, мы предполагаем изложить в другом месте.

Поступила в редакцию
4 сентября 1953 г.

Литература

- [1] П. П. Феофилов. ДАН СССР, **92**, 545, 743, 1953.—[2] См., например, П. П. Феофилов. Усп. физ. наук, **36**, 417, 1948.—[3] А. Митчелли и М. Земанский. Резонансное излучение и возбужденные атомы, ОНТИ, М.—Л., 1937, стр. 228 и след.—[4] М. Ф. Дейген. ЖЭТФ, **21**, 992, 1951.—[5] С. И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов, ГИТТЛ, М.—Л., 1951, стр. 175 и след.

ВЫХОД ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НЕКОТОРЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

М. Д. Галанин и З. А. Чижикова

Методом Аленцева и Винокурова [1] измерен абсолютный квантовый выход фотолюминесценции мелкокристаллических органических веществ (парадифенилбензола, антрацена, стильбена, нафталина и др.). Для антрацена измерен выход люминесценции плоского кристаллика путем сравнения с раствором флуоресцеина; показано, что при введении соответствующих поправок получается выход, близкий к единице.

Большая часть измерений абсолютного выхода фотолюминесценции проводилась с растворами, и данные о выходе фотолюминесценции органических кристаллов имеют только ориентировочный характер (см., например, [2]). В настоящей работе для получения количественных данных относительно выхода люминесценции мелкокристаллических порошков органических веществ, люминесцирующих в ближней ультрафиолетовой и синей областях спектра, применен метод, разработанный Аленцевым и Винокуровым [1] для измерения выхода ультрафиолетовой люминесценции кристаллофосфоров. Для определения выхода фотолюминесценции монокристаллических пластинок антрацена применен метод сравнения с раствором флуоресцеина. Выход флуоресценции применявшегося раствора был определен заново на фотоэлектрической установке.

1. Измерение выхода фотолюминесценции в мелкокристаллических порошках

Метод Аленцева и Винокурова [1] основан на измерении возбуждающего излучения и излучения люминесценции по яркости флуоресценции раствора флуоресцеина, люминесцирующего под действием этих излучений. Благодаря постоянству квантового выхода флуоресценции раствора (закон Вавилова), яркость его флуоресценции пропорциональна соответственно числу квантов в возбуждающем излучении и в исследуемой люминесценции. Это дает возможность определить непосредственно квантовый выход люминесценции. Условия применимости этого метода сформулированы в [1] и соблюдались при наших измерениях.

Для измерений применялась следующая схема установки. Кварцевая ртутная лампа низкого давления освещала две плоские круглые площадки, одна из которых представляла собой поверхность мелкокристаллического порошка люминесцирующего вещества, а вторая — поверхность, покрытую напыленной на нее окисью магния. Рассеянное от этих поверхностей излучение лампы и свет люминесценции падали соответственно на две кварцевые кюветы с раствором флуоресцеина. Яркости флуоресценции раствора в кюветах сравнивались при помощи фотометра УФ. Для разделения возбуждающего света и света люминесценции нами применялся (в отличие от [1]) светофильтр из плексигласа, задерживающий возбуждающий свет (в основном линия 254 мμ) и прозрачный для света люминесценции.

В предположении, что рассеянный свет и свет люминесценции имеют одинаковое угловое распределение [1], отношение яркостей

флуоресценции в кюветах с раствором флуоресцеина в отсутствие фильтра равно

$$a = (I_{\lambda} + I'_{\nu} + I') / (I_{\nu} + I),$$

где I_{ν} — число квантов в падающем свете, возбуждающем люминесценцию, I — число квантов в длинноволновом свете (не возбуждающем люминесценции), отраженном поверхностью окиси магния, I'_{ν} и I' — то же для поверхности исследуемого порошка, I_{λ} — число квантов люминесценции. Если поставить светофильтр перед кюветой с флуоресцеином со стороны порошка, то измеряемое отношение яркостей

$$b = k(I_{\lambda} + I') / (I_{\nu} + I),$$

где k — пропускательность фильтра для длинноволновой части спектра ($k \approx 0,9$). При светофильтре, помещенном перед ртутной лампой со стороны порошка, отношение яркостей

$$c = kI' / (I_{\nu} + I),$$

и, наконец, когда светофильтр стоит перед флуоресцеином со стороны окиси магния, отношение равно

$$d = (I'_{\nu} + I' + I_{\lambda}) / kI.$$

По данным этих четырех фотометрических измерений вычисляется квантовый выход $B_{\text{кв}}$:

$$B_{\text{кв}} = I_{\lambda} / (I_{\nu} - I'_{\nu}) = (b - c) / k \left(1 - \frac{1}{k} \frac{a}{d} - a + \frac{b}{k} \right).$$

В качестве примера в табл. 1 приведены значения квантового выхода (средние из пяти отсчетов), полученные для порошка антрацена в одном из измерений. Для исключения возможного различия в освещении двух поверхностей производились два измерения (1 и 2 в табл. 1) при перемене местами люминофора и окиси магния, и бралось среднее геометрическое из двух отсчетов.

Таблица 2

Абсолютный квантовый выход $B_{\text{кв}}$ фотолюминесценции

Вещество	$B_{\text{кв}}$	Примечания
Парадифенилбензол .	$0,82 \pm 0,05$	* Чистый синтетический антрацен. При освещении ртутной лампой низкого давления (254 мμ) яркость люминесценции уменьшается (в наших условиях на 25% за 1 час). Приведено значение, экстраполированное к нулевому времени освещения. ** Степень чистоты препаратов неизвестна.
Антрацен *	$0,70 \pm 0,04$	
Стильбен	$0,50 \pm 0,03$	
Флуорен **	$0,33 \pm 0,02$	
Фенантрен **	$0,28 \pm 0,02$	
Нафталин	$0,16 \pm 0,01$	
Дифенил	$0,16 \pm 0,01$	
Дифениламин	$0,03 \pm 0,01$	

Вероятная относительная ошибка в определении выхода из-за случайных ошибок фотометрирования составляет 6%.

В табл. 2 приведены значения $B_{\text{кв}}$, измеренные описанным методом для ряда люминесцирующих органических кристаллов.

2. Измерение энергетического выхода люминесценции монокристаллических пластинок антрацена методом сравнения с раствором флуоресцеина

При возгонке антрацена получают тонкие пластинки весьма однородные и с хорошей поверхностью (см. [3, 4]), вполне пригодные для определения выхода фотолюминесценции антрацена методом сравнения с раствором флуоресцеина.

Предварительно был измерен выход люминесценции раствора флуоресцеина (раствор в глицерине с NaOH, концентрация $2 \cdot 10^{-3}$ г/мл) по методу Вавилова [5]. Это измерение производилось при помощи монохроматора УМ-2, за выходной щелью которого стоял фотоумножитель Кубецкого. Спектральная чувствительность установки была тщательно определена по лампам накаливания с известными цветовыми температурами при фиксированных условиях освещения выходной щели монохроматора, сохранявшихся при дальнейших измерениях.

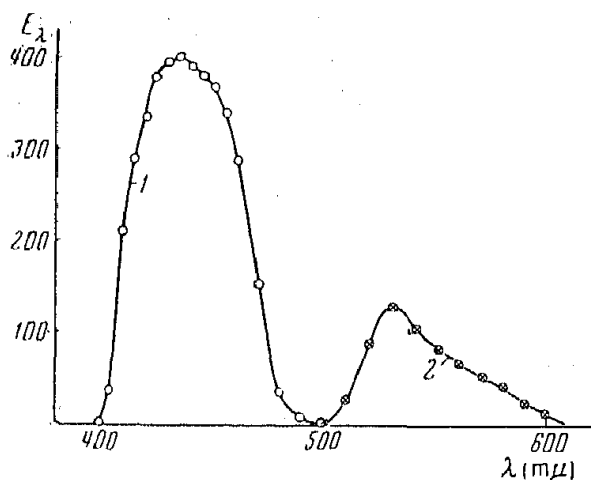


Рис. 1. Распределение энергии в спектрах возбуждающего света, рассеянного на окиси магния (1) и раствора флуоресцеина в глицерине ($c = 2 \cdot 10^{-3}$ г/мл) (2)

Для возбуждения люминесценции применялась лампа накаливания (точечная лампа) с системой светофильтров. Возбуждающий источник фокусировался поочередно на кювету с флуоресцеином и поверхность окиси магния при помощи двухлинзового конденсора, дававшего сравнительно большое равномерно освещенное пятно. Ахроматический конденсор давал изображение этого пятна на входной щели монохроматора. Поверхности кюветы и окиси магния были перпендикулярны к оси монохроматора, а возбуждающий пучок составлял с ней небольшой угол ($\sim 30^\circ$). На рис. 1 приведены кривые распределения энергии в спектрах света, рассеянного экраном из MgO , и света люминесценции флуоресцеина. Ординаты первой кривой уменьшены в четыре раза, чтобы учесть различие в угловом распределении излучения [5]. Отношение площадей под кривыми равно¹ $0,29 \pm 0,01$.

Так как поглощение возбуждающего света в растворе полное, то, с учетом отражающей способности окиси магния в данной области спектра (0,98), выход люминесценции раствора флуоресцеина равен $0,28 \pm 0,01$.

Сравнение люминесценции кристалла антрацена и раствора флуоресцеина производилось на том же монохроматоре. Кристаллы сажались на оптический контакт с плоской стеклянной пластинкой. Было исследовано большое число кристаллов, причем для кристаллов с хорошей поверхностью результаты хорошо воспроизводились.

Возбуждение люминесценции производилось от ртутной лампы СВД-Ш-250 через фильтр, пропускавший в основном область около 365 мμ. Поглощение возбуждающего света как в растворе, так и в кри-

сталле антрацена было измерено методом сравнения с раствором флуоресцеина. Выход люминесценции кристалла антрацена составил $0,25 \pm 0,01$.

Возбуждение люминесценции производилось от ртутной лампы СВД-Ш-250 через фильтр, пропускавший в основном область около 365 мμ. Поглощение возбуждающего света как в растворе, так и в кри-

¹ Относительно расхождения этого значения с обычно применяемым для растворов флуоресцеина см. раздел 3.

сталле было полным. Коэффициент отражения возбуждающего света от кристалла, измеренный при помощи фотоэлемента, оказался равным 9%. На рис. 2 приведены кривые распределения энергии в спектрах люминесценции кристалла антрацена и раствора флуоресцеина. Кривая для антрацена представляет среднее из результатов измерений для наиболее однородных и правильных кристаллов. Отношение площадей под кривыми для антрацена и флуоресцеина равно $1,09 \pm 0,03$. Отсюда для энергетического выхода люминесценции кристалла антрацена, учитывая изменение энергетического выхода флуоресцеина при переходе от области возбуждения 435 мμ к 365 мμ, получим

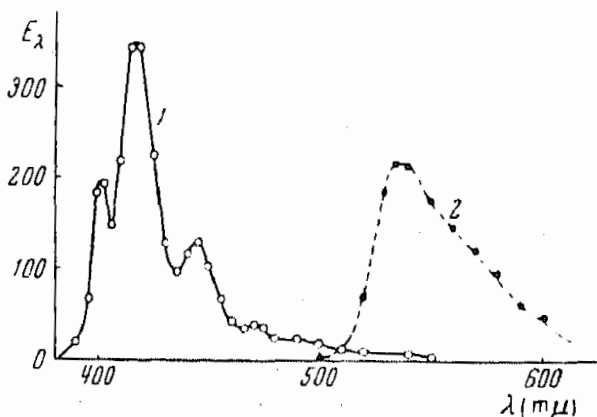


Рис. 2. Распределение энергии в спектрах кристалла антрацена (1) и раствора флуоресцеина (2) при возбуждении $\lambda = 365$ мμ

$$0,28 \cdot 1,09 (365/435) (1,09/1,04) = 0,27 \pm 0,02.$$

(Множитель $1,09/1,04$ учитывает небольшое различие в отражении возбуждающего света от поверхностей кристалла и раствора.)

3. Обсуждение результатов

Значения выхода люминесценции, полученные для порошкообразных веществ, в частности, для антрацена, не представляют собой истинного

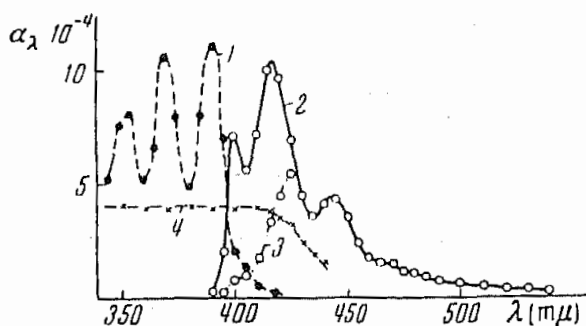


Рис. 3. 1 — спектр поглощения кристалла антрацена, 2 — спектр люминесценции монокристаллической пластинки, 3 — спектр люминесценции порошка антрацена (длинноволновые части кривых 2 и 3 совмещены), 4 — зависимость относительного квантового выхода антрацена от длины волны возбуждающего света

выхода их люминесценции. В порошках неизбежны многократное отражение и рассеяние, приводящие к реабсорбции люминесценции. Влияние реабсорбции может быть различным для разных веществ. Так, например, для антрацена реабсорбция приводит к заметному изменению формы спектра порошка по сравнению со спектром тонкого отдельного кристалла (рис. 3). Однако, как следует из зависимости выхода от длины волны возбуждающего света (рис. 3)², довольно значительная часть реабсорби-

рованного света возвращается в виде люминесценции. Все же несомненно, что часть света люминесценции теряется и полученные значения квантового выхода меньше истинных.

При измерениях методом сравнения люминесценции плоского кристаллика с люминесценцией раствора в кювете (раздел 2) необходимо вводить поправки на преломление света люминесценции на плоской границе.

² Для исключения влияний отражений коэффициент поглощения определялся путем измерения поглощения света в кристалликах разной толщины, устанавливающихся на средней щели двойного кварцевого монохроматора Хильгера, за выходной щелью которого стоял фотоумножитель. Зависимость квантового выхода от длины волны измерялась на том же монохроматоре путем сравнения люминесценции антрацена и раствора флуоресцеина.

Преломление на границе двух сред с отношением показателей преломления n приводит к тому, что яркость люминесценции, наблюдаемой по нормали к границе, оказывается в n^2 раз меньше, чем средняя яркость (см. [6], где приведена литература, а также [7]). Так, например, учет этой поправки в случае измеренного нами выхода раствора флуоресцеина приводит к значению энергетического выхода $0,28 \cdot (1,47)^2 \approx 0,60$. Если учесть отражение возбуждающего света и света люминесценции на границе, это значение должно быть увеличено еще на $\sim 8\%$. Для квантового выхода получаем приблизительно $0,60 \cdot 1,08 \cdot (540/435) = 0,81$, что согласуется со значениями, полученными для водного раствора флуоресцеина методами, в которых интегрируется излучение по всем направлениям [7,8]. Отметим, впрочем, что в нашем растворе имеется небольшое концентрационное тушение (на 18%). Пересчет к нулевой концентрации дает квантовый выход 0,99, т. е. в пределах ошибок равный единице.

Введение соответствующей поправки в случае анизотропной среды значительно сложнее. В этом случае необходимо учитывать: 1) отражение света люминесценции на границе, 2) влияние преломления на границе анизотропной среды, 3) поляризацию люминесценции, 4) расположение осцилляторов в кристалле и соответствующую анизотропию излучения. При этом необходимо принять во внимание изменение углового распределения излучения осциллятора в анизотропной среде [9].

Вычисление углового распределения люминесценции усложняется сильной дисперсией показателей преломления кристалла антрацена и представляет самостоятельную задачу. Для приближенной оценки поправки, которую нужно ввести в значение выхода (наибольшая поправка обусловлена влиянием преломления света на границе кристалла), можно воспользоваться величинами показателей преломления, измеренными в работе Обреимова, Прихотько и Родниковой [4], и принять во внимание, что свечение антрацена поляризовано со степенью поляризации $p \approx 0,4$, причем направление поляризации составляет небольшой угол φ с кристаллографической осью b [10] (плоскость пластинки кристалла — плоскость ab). Тогда соответствующая поправка будет иметь вид:

$$\left(\frac{1-p}{2} + p \sin^2 \varphi\right) n_a^2 + \left(\frac{1-p}{2} + p \cos^2 \varphi\right) n_b^2.$$

Принимая для грубой оценки значения показателей преломления, соответствующие средней длине волны спектра люминесценции (~ 420 м μ) $n_a = 1,77$; $n_b = 2,05$, получим поправочный множитель равный 3,9, что дает значение выхода, близкое к единице. Если принять во внимание сказанное выше о реабсорбции, это значение согласуется с измерениями выхода люминесценции в порошке антрацена (раздел 1).

Авторы благодарны М. Н. Аленцеву за обсуждение этой работы.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
31 августа 1953 г.

Литература

- [1] М. Н. Аленцев и Л. А. Винокуров. Изв. АН СССР, сер. физ., 15, 725, 1951. — [2] П. Прингсгейм. Флуоресценция и фосфоресценция, ИИЛ, 1951, стр. 253. — [3] И. В. Обреимов и А. Ф. Прихотько. Sow. Phys., 9, 34, 1936. — [4] И. В. Обреимов, А. Ф. Прихотько и И. В. Родникова. ЖЭТФ, 18, 409, 1948. — [5] С. И. Вавилов. ZS. f. Phys., 22, 266, 1924. — [6] Th. Förster, Fluoreszenz organischer Verbindungen, Göttingen, Vandenhoeck & Ruprecht, 1951, стр. 37. — [7] М. Н. Аленцев. ЖЭТФ, 21, 133, 1951. — [8] L. S. Forster a. R. Livingston. Journ. Chem. Phys., 20, 1315, 1952. — [9] В. Л. Гинзбург. ЖЭТФ, 10, 601, 1940. — [10] Н. Д. Жевандров. ДАН СССР, 83, 677, 1952.

НЕКОТОРЫЕ АНОМАЛИИ В ПОВЕДЕНИИ МЕТАЛЛОВ, НАГРЕВАЕМЫХ ИМПУЛЬСАМИ ТОКА БОЛЬШОЙ ПЛОТНОСТИ

С. В. Лебедев и С. Э. Хайкин

Исследовалась зависимость электропроводности металлической проволоки от поступающей в нее энергии при плотности тока $\sim 10^7$ А/см². При этом наблюдался аномальный ход этой зависимости, указывающий на необычное состояние самого металла.

Экспериментальное исследование поведения металлических проводников при очень большой плотности тока чрезвычайно затруднено сильным их нагреванием и быстрым разрушением.

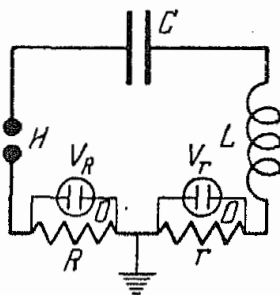
В работе [1] путем интенсивного охлаждения компенсировалось нагревание хороших металлических проводников при плотности постоянного тока $5 \cdot 10^6$ А/см², причем никаких аномалий электропроводности обнаружено не было.

В наших экспериментах мы не стремились к получению стационарного состояния, а пытались исследовать свойства металла в процессе его нагревания импульсами тока большой плотности. Такой метод¹ позволяет экспериментировать при плотностях тока $\sim 10^7$ А/см². При этом можно исследовать процесс нагревания проводника до момента его разрушения.

1. Методика измерений

В тонкую металлическую проволоку очень быстро вводилось большое количество энергии путем пропускания через нее сильного тока,

Рис. 1. Принципиальная схема установки (контур I). О — обкладка осциллографа, С — конденсатор, L — катушка самоиндукции, И — искровое реле, r — эталон сопротивления, R — исследуемая проволока



разряжающего конденсатор. Течение процессов, происходящих при этом в металле, изучалось по полученным при помощи катодного осциллографа осциллограммам напряжений на исследуемой проволоке с сопротивлением R и на эталонном сопротивлении r . Эталон сопротивления r был изготовлен из константановой проволоки, сечение которой велико сравнительно с сечением исследуемой проволоки. Поэтому эталон r в течение опыта практически не нагревался и его сопротивление не изменялось.

¹ Этот метод применялся многими авторами [2–5] для изучения взрыва проволок под действием сильного тока, но нам известны только две работы [6,7], в которых он использовался для изучения свойств металла до момента его разрушения.

Принципиальная схема нашей экспериментальной установки показана на рис. 1. Опыты производились как при колебательном, так и при апериодическом разряде конденсатора C (при апериодическом разряде катушка самоиндукции L заменялась дополнительным сопротивлением).

Напряжения $V_R(t) = i(t)R(t)$ и $V_r(t) = i(t)r$ позволяют найти силу тока $i(t)$, сопротивление проволоки

$$R = \frac{V_R(t)}{V_r(t)} r \quad (1)$$

и энергию, поступившую в нее из контура с момента t_1 до момента t_2 ,

$$E_{t_1}^{t_2} = \frac{1}{r} \int_{t_1}^{t_2} V_R V_r dt. \quad (2)$$

В приведенных выше выражениях для V_R и V_r пренебрегается скин-эффектом и индуктивным сопротивлением проволоки и эталона r . Законность такого пренебрежения в условиях наших опытов проверялась путем контрольных измерений и вычисления по (1) заранее известных постоянных сопротивлений, включенных в контур I на место проволоки R . При этом было выяснено, что формула (1) дает неправильное значение сопротивления R только для самого начала осциллограмм, в промежутке времени $t_1 - t_0$ после момента t_0 включения тока. Величина $t_1 - t_0$ уменьшается при уменьшении самоиндукции проводников R и r . Отсюда ясно, что в течение времени $t_1 - t_0$ нельзя пренебрегать их самоиндукцией в выражениях V_R и V_r .² Очевидно, формула (2) для этого промежутка времени также теряет смысл. В наших опытах минимальная величина $t_1 - t_0$ была около 1—2 мсек. При плотности тока $j \leq 10^6$ А/см² скорость нагревания исследуемой проволоки такова, что за время $t_1 - t_0$ ее сопротивление почти не меняется³ [величина сопротивлений R , найденная по (1) для момента t_1 , в пределах точности измерения не отличается от величины R перед началом опыта]. При таких j формулы (1) и (2) применимы практически в течение всего времени нагревания. По мере увеличения j скорость поступления энергии в проволоку возрастает и соответственно возрастает область изменения R и E , которая не может быть исследована при помощи формул (1) и (2). При увеличении j выше $\sim 2 \cdot 10^7$ А/см² время нагревания проволоки до момента ее разрушения сокращается до нескольких микросекунд, т. е. приближается к величине $t_1 - t_0$. Поэтому при $j > 2 \cdot 10^7 \div 3 \cdot 10^7$ А/см² измерение сопротивления и поступающей в проволоку энергии по формулам (1) и (2) в наших опытах становилось невозможным.

Приведенные здесь ориентировочные значения j относятся к вольфраму, но они не меняются по порядку величины при переходе от одного металла к другому. Эти данные относятся не только к случаю постоянного тока, но и к случаю колебательного разряда в контуре I с периодом $\tau \leq 10^{-5}$ сек. (времена нагревания проволоки до момента ее разрушения при постоянном токе и при переменном токе периода $\tau \leq 10^{-5}$ сек. мало различаются, если плотность постоянного тока равна среднему значению плотности переменного тока).

² Имеется в виду самоиндукция не только проводников R и r , но всего участка цепи между точками подключения осциллографа.

³ Опыты производились с чистыми металлами, для которых о нагревании можно судить по изменению сопротивления.

Из опытов по плавлению плавких предохранителей известно, что при токах $j \gtrsim 10^5$ А/см² потери энергии проволокой всегда малы сравнительно с энергией, необходимой для ее нагрева и плавления [8]. В наших опытах плотность тока была выше, чем 10^5 А/см². Следовательно, потери энергии в процессе нагрева проволоки можно было не учитывать.

В рассматриваемых в настоящей статье опытах проволоки всегда разрушались.

2. Качественная характеристика процесса нагрева металлических проволок током большой плотности. Скачок сопротивления

Эксперименты показали, что при нагревании проволок током $j \approx 10^7$ А/см² в некоторый момент t_c происходит скачкообразное увеличение напряжения V_R , причем напряжение V_r в этот момент не нарастает. На рис. 2 приведены осциллограммы $V_R(t)$ и $V_r(t)$, снятые одновременно с вольфрамовой проволоки и постоянного сопротивления r . Скачок V_R указан на осциллограмме 1 стрелкой. Момент возникновения скачка и весь ход осциллограмм до этого момента не зависят от того, находится ли проволока в масле, воде, спирте, парафине или канифоли. В случае не особенно тугоплавких металлов (например Cu) такой же результат получается и для воздуха. Однако воздушная среда непригодна для опытов с тугоплавкими материалами, в частности с вольфрамом. У поверхности вольфрамовой проволоки в воздухе еще до момента t_c вспыхивает шунтирующий разряд, в результате чего плотность тока в проволоке падает (см. раздел 4). Таким образом характер среды, окружающей проволоку, не влияет на ход процесса нагрева до момента t_c , если только эта среда не становится электропроводной.

Изменяя амплитуду тока путем изменения начального напряжения на конденсаторе C в случае колебательного разряда в контуре L , можно получить скачок V_R при различных значениях тока i . Например, на осциллограмме 3 рис. 3 скачок V_R наблюдается вблизи нулевого значения тока, на осциллограмме 1 рис. 3 — вблизи его максимального значения. Отсюда видно, что это явление не связано с каким-либо определенным мгновенным значением плотности тока.

Как показали опыты, проведенные с проволоками различной длины и сечения, момент возникновения скачка V_R для данного металла определяется только плотностью тока $j(t)$ в течение всего времени $t_c - t_0$. Следовательно, появление скачка обусловлено изменением объемных свойств металла в результате протекания тока. Поэтому, а также ввиду того что среда, окружающая проволоку, не электропроводна, резкое нарастание величины $(V_R/V_r) r$ свидетельствует о резком увеличении сопротивления проволоки.

Скачкообразный характер изменения dR/dt в момент t_c хорошо заметен в случае нагрева проволоки током слабо затухающего колебательного разряда, когда изменение R мало сказывается на силе тока i . Например, согласно осциллограмме 1 рис. 3, dR/dt сильно меняется за такое короткое время, в течение которого как сила тока i , так и самое сопротивление R остаются практически постоянными. Таким образом, скорость поступления энергии в металл dE/dt не изменяется за время изменения dR/dt . Следовательно, резкое изменение величины

$$\frac{dR}{dt} = \frac{dR}{dE} \frac{dE}{dt}$$

определяется тем, что в момент t_c изменяется характер зависимости R от E .

Рассматриваемые скачки сопротивления служат причиной явления, известного под названием «паузы тока» [4-6]. Это явление заключается в том, что в контуре I ток i , нагревающий проволоку, на некоторое время прекращается, хотя конденсатор C еще не разряжен. Отсюда видно, что нарастание сопротивления, начавшееся в момент t_c , может продолжаться до полного исчезновения проводимости. Однако характер убывания тока i при нарастании R сильно зависит от параметров контура I , напряжения на конденсаторе C и длины исследуемой проволоки. В частности, скачок R вообще практически не приводит к убыванию тока i , если параметры контура I таковы, что i очень мало зависит от R . В этом случае напряжение на проволоке достигает значения пробивного напряжения, когда R еще не успевает возрасти настолько, чтобы ток i заметно уменьшился⁴. Например, ход кривой 2 на рис. 2 указывает на незначительное уменьшение тока i , вызванное скачком R .

Осциллограмма 3 рис. 3 подтверждает, что нарастание V_R прекращается в связи с появлением разряда между контактами, в которых закреплены концы исследуемой проволоки. После максимального значения $|V_R|$ осциллограмма 3 рис. 3 приобретает вид, типичный для дуги (при прохождении тока i через нуль V_R меняется скачком).

Аналогичные явления наблюдаются и при апериодическом разряде конденсатора в контуре I , если вместо катушки самоиндукции L поставлено большое сравнительно с R сопротивление ρ . Например, кривая 2 на рис. 4 указывает на незначительное уменьшение тока i во время скачка R . (При уменьшении ρ падение тока i , начинающееся в момент t_c , становится более значительным, и при достаточно малых ρ ток i падает до нуля; однако он возникает вновь [4-6] после того, как появляется проводимость в расширяющемся облаке паров, образовавшихся при разрушении проволоки.) Таким образом очевидно, что изменение состояния проволоки после момента t_c уже не определяется только полным током i , а существенно зависит от характера среды, в которой она находится, и от свойств питающего устройства.

Явления, рассмотренные до сих пор в настоящей статье, относятся ко всем металлам, с которыми мы экспериментировали (W, Fe, Cu, Ag, Pb). Величина плотности нагревающего тока j , при которой наблюдаются скачки сопротивления, для различных металлов различна⁵. Например, при уменьшении амплитуды колебательного разряда в контуре I от $j_0 = 2 \cdot 10^7$ А/см² до $j_0 = 1,5 \cdot 10^7$ А/см² в случае серебра (рис. 5, 2 и 1) скачок V_R пропадает, но в случае свинца он не исчезает даже при $j_0 = 5,5 \cdot 10^6$ А/см² (рис. 5, 3).

В опытах с железом скачок V_R наблюдается⁶ при $j_0 = 1,3 \cdot 10^7$ А/см² и отсутствует при $j_0 = 3,2 \cdot 10^6$ А/см² (рис. 6, 1 и 3). Исчезновение скачков V_R с уменьшением j наблюдается для всех перечисленных выше металлов. Следует иметь в виду, что приведенные здесь данные относительно величины j , при которой наблюдается скачок V_R , получены для переменного тока, период которого τ не во всех этих примерах был одинаков.

⁴ Мы работали именно с такими схемами, так как при неизменном i по изменению $V_R = iR$ легче судить об изменении R .

⁵ Нагревающий ток j в случае слабо затухающего колебательного разряда определяется периодом разряда τ и амплитудой j_0 .

⁶ Разрывы линии $V_R(t)$ вблизи точек $i = 0$ на кривых рис. 5, 1 и 6, 3 (отмеченные стрелками) указывают на появление участков неметаллической проводимости вдоль проволоки.

Итак, в случае больших j состояние материала проволоки в момент $t \leq t_c$ определяется плотностью протекавшего тока $j(t)$ во всем про-

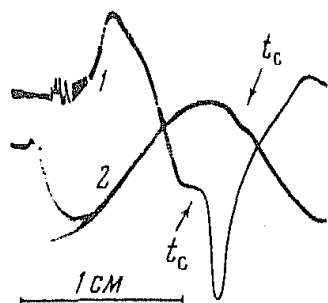


Рис. 2

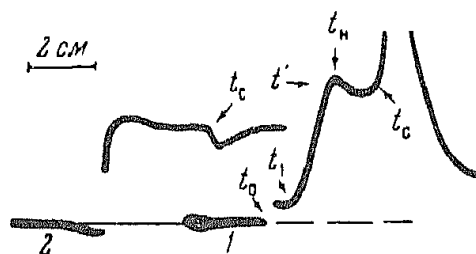


Рис. 4

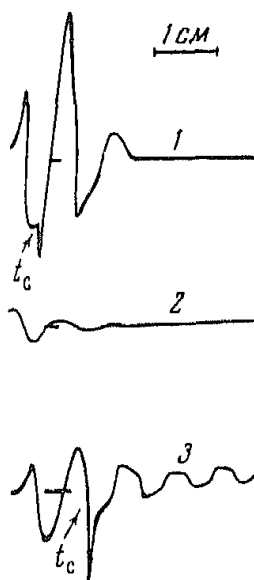


Рис. 3

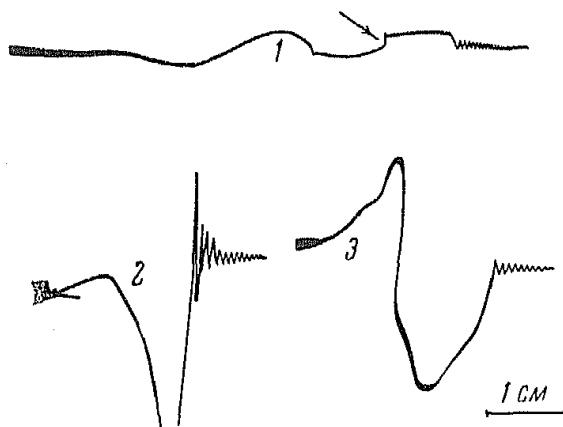


Рис. 5

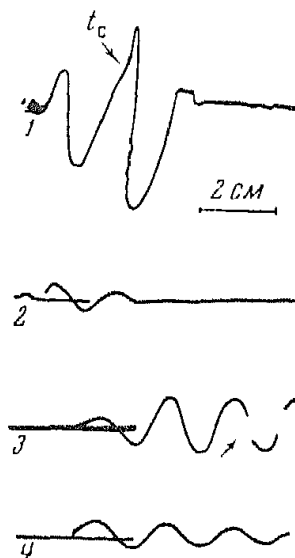


Рис. 6

Рис. 2. Осциллограммы $V_R(t)$ (кривая 1) и $V_r(t)$ (кривая 2) вольфрамовой проволоки, диаметр 0,06 мм, $l=1$ см (в масле). Ток $j(\tau/4)=12,4 \cdot 10^6$ А/см². Период разряда $\tau=12 \cdot 10^{-6}$ сек. Чувствительность осциллографа по лучу R , $a_R=210$ В/мм и по лучу r , $a_r=34$ В/мм. Масштаб времени $b=8 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, $r=0,49$ Ω

Рис. 3. Осциллограммы $V_R(t)$ и $V_r(t)$ железной проволоки. 1 — $V_R(t)$, 2 — $V_r(t)$ для проволоки в масле, $j(\tau/4)=15 \cdot 10^6$ А/см², 3 — $V_R(t)$ для такой же проволоки в воздухе при $j(\tau/4)=12 \cdot 10^6$ А/см², $r=1,2$ Ω, $\tau=5,3 \cdot 10^{-6}$ сек., $b=6,3 \cdot 10^{-7}$ сек./мм

Рис. 4. Осциллограммы $V_R(t)$ (кривая 1) и $V_r(t)$ (кривая 2) вольфрамовой проволоки в канифоли, диаметр 0,1 мм, $l=1$ см, $r=1$ Ω, $a_R=a_r=25,6$ В/мм, $b=2,8 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, $j(t_0)=9,3 \cdot 10^6$ А/см²

Рис. 5. Осциллограммы $V_R(t)$ серебряной и свинцовой проволоки. 1 и 2 — серебряная проволока в масле; 1 — $j(\tau/4)=15 \cdot 10^6$ А/см²; 2 — $j(\tau/4)=20 \cdot 10^6$ А/см²; 3 — свинцовая проволока в масле, ток $j(\tau/4)=5,5 \cdot 10^6$ А/см². Масштаб времени: для 1 и 2 $b=6,3 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, для 3 $b=4,7 \cdot 10^{-7}$ сек./мм; $\tau=11,3 \cdot 10^{-6}$ сек.

Рис. 6. Осциллограммы $V_R(t)$ и $V_r(t)$ железной проволоки, диаметр 0,05 мм, в масле. 1 — $V_R(t)$, 2 — $V_r(t)$; $\tau=5,3 \cdot 10^{-6}$ сек.; $j(\tau/4)=13,5 \cdot 10^6$ А/см²; $r=1,2$ Ω, $l=1$ см; $b=3 \cdot 10^{-7}$ сек./мм; $a_R=a_r=80$ В/мм; 3 — $V_R(t)$, 4 — $V_r(t)$; $\tau=2,6 \cdot 10^{-6}$ сек., $j(\tau/4)=3,2 \cdot 10^6$ А/см², $r=4,3$ Ω, $l=2$ см, $b=1,3 \cdot 10^{-6}$ сек./мм, $a_R=a_r=72$ В/мм

межутке времени $t-t_0$. В момент $t=t_c$ зависимость R от E резко изменяется, и начинается очень быстрое возрастание R . Для $t \leq t_c$ по осциллограммам при помощи формул (1) и (2) можно получить количественные данные о состоянии материала проволоки. При $t > t_c$ со-

стояние материала проволоки сильно зависит от внешних условий (от свойств окружающей среды и особенностей питающего контура I). При этом формулы (1) и (2) уже не определяют сопротивления и энергии проволоки.

3. Результаты измерения энергии и сопротивления вольфрамовых и железных проволок, нагреваемых током $\sim 10^7$ А/см²

Характерная особенность состояния металла в момент t_c видна из сопоставления величины сопротивления при $t = t_c$ и энергии $E_{t_0}^{t_c}$ (как уже отмечалось, при $j > 10^5$ А/см² потери энергии могут не учитываться, и в момент t_c вся энергия $E_{t_0}^{t_c}$ должна находиться в проволоке). Для железа и вольфрама в пределах точности измерений всегда $R(t_c) = R_{пл}^{TB}$, где $R_{пл}^{TB}$ ⁷ — обычное значение сопротивления при температуре плавления в твердом состоянии. Однако энергия $E_{t_0}^{t_c}$ оказывается при этом значительно больше энергии W_n , необходимой для нагревания данной проволоки от комнатной температуры до начала плавления в обычных условиях (без потерь энергии).

Для иллюстрации этого положения приведем примеры:

Пример 1 (рис. 7). Вольфрамовая проволока диаметром 0,19 мм, длиной $l = 0,75$ см взрывается в парафине током $j(\tau/4) = 13,4 \cdot 10^6$ А/см

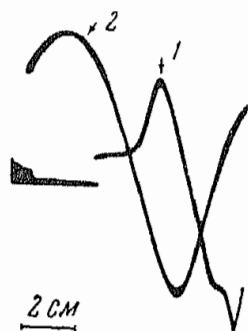


Рис. 7. Осциллограммы $V_R(t)$ (кривая 1) и $V_r(t)$ (кривая 2) вольфрамовой проволоки в парафине, диаметр 0,19 мм, $l = 0,75$ см, $r = 0,32 \Omega$, $b = 1,4 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, $a_R = a_r = 25$ В/мм; $\tau = 10^{-5}$ сек., $j(\tau/4) = 13,4 \cdot 10^6$ А/см²

колебательного разряда конденсатора. Период разряда $\tau = 10^{-5}$ сек., $R_{пл}^{TB} = 0,3 \Omega$, $W_n = 2,23$ дж. Зная чувствительность осциллографа $a_R = a_r = 25$ В/мм, масштаб времени $b = 1,4 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, сопротивление эталона $r = 0,32 \Omega$ для момента $t_c \approx 3\tau/4$, по осциллограммам при помощи (1) и (2) находим

$$R(t_c) = 0,29 \Omega \approx R_{пл}^{TB}, \quad E_{t_0}^{t_c} = 8,4 \text{ дж} = 3,8 W_n.$$

Таким образом при энергии $E_{t_0}^{t_c}$, в несколько раз превышающей W_n , сопротивление проволоки не превышает $R_{пл}^{TB}$. При вычислении $E_{t_0}^{t_c}$, начальный участок осциллограммы рис. 7, 1, для которого за счет индуктивности $V_R > iR$, исправлен тем, что проведена прямая линия от конца нижнего горизонтального отрезка до точки первого пересечения кривой рис. 7, 1 с кривой рис. 7, 2. Потери на испарение можно не учитывать, так как даже при условии, что в течение всего времени $t_c - t_0$ поверхность проволоки находится при температуре кипения вольфрама, эти потери дали бы меньше одного процента от $E_{t_0}^{t_c} - W_n$.

⁷ Величины $R_{пл}^{TB}$, W_n , $W_{пл}$ взяты из таблиц для чистых металлов.

Пример 2 (рис. 6, 1 и 2). Железная проволока диаметром 0,05 мм, длиной 1 см, погруженная в трансформаторное масло, взрывается током $j(\tau/4) = 13,5 \cdot 10^6$ А/см² колебательного разряда конденсатора ($\tau = 5,3 \cdot 10^{-6}$ сек.). Для этой проволоки сопротивление в начале опыта $R_0 = 0,5 \Omega$, $W_{\text{н}} = 0,16$ дж, энергия обычного плавления $W_{\text{пл}} = 0,03$ дж. Зная $a_R = a_r = 80$ В/мм, $b = 3 \cdot 10^{-7}$ сек./мм, $r = 1,2 \Omega$, по (1) и (2) находим

$$\frac{E_{t_0}^{t_c}}{W_{\text{н}}} = 4,5; \quad \frac{E_{t_0}^{t_c}}{W_{\text{н}} + W_{\text{пл}}} = 3,8; \quad R(t_c) = 11,4 R_0 \approx R_{\text{пл}}^{\text{тв}}.$$

Отметим, что избыток энергии $\mathcal{E}_c = E_{t_0}^{t_c} - W_{\text{н}}$ можно было бы объяснить потерями на излучение в том случае, если бы в течение всего времени $t_c - t_0$ поверхность проволоки имела температуру $\sim 30\,000^\circ$ и излучала как черное тело.

Пример 3 (рис. 4). Для того чтобы выяснить ход dR/dE на разных стадиях нагревания металла, рассмотрим следующий пример.

Вольфрамовая проволока диаметром 0,1 мм, длиной 1 см, залитая канифолью, взрывается при апериодическом разряде⁸ конденсатора током $j \approx 9 \cdot 10^6$ А/см² ($r = 1 \Omega$, $a_R = a_r = 25,6$ В/мм, $b = 2,8 \cdot 10^{-7}$ сек./мм). Для этой проволоки $W_{\text{н}} = 0,9$ дж, $W_{\text{пл}} = 0,39$ дж, $R_{\text{пл}}^{\text{тв}} = 1,3 \Omega$.

Как отмечалось выше, по начальному участку осциллограмм нельзя определять dR/dE при помощи формул (1) и (2), так как в момент включения тока нельзя пренебрегать самоиндукцией проволоки и эталона. Измерение dR/dE начато с точки t_1 (рис. 4, 1), причем сначала для dR/dE получалась ее обычная для вольфрама величина. Однако в дальнейшем dR/dE уменьшалась и даже принимала отрицательное значение. Точка, соответствующая максимальному значению V_R в области уменьшения dR/dE , отмечена на осциллограмме 4, 1 значком $t_{\text{н}}$. Величина сопротивления R в этой точке, в пределах точности опыта ($\sim 10\%$), совпадает с $R_{\text{пл}}^{\text{тв}}$. Для точек, отмеченных на осциллограмме, при подсчете энергии по (2) получилось

$$E_{t_0}'' \approx E_{t_1}'' = 1,2 W_{\text{н}}, \quad E_{t_0}^{t_{\text{н}}} = 1,35 W_{\text{н}}, \quad E_{t_0}^{t_c} = 3,7 W_{\text{н}}$$

(величина $E_{t_0}^{t_1}$ не учитывалась, так как $E_{t_0}^{t_1} \ll E_{t_1}''$).

Отметим, что избыток энергии $\mathcal{E} = E - W_{\text{н}}$ наблюдается уже в точке t' , где $R \ll R_{\text{пл}}^{\text{тв}}$. Далее за время $t_c - t_{\text{н}}$ в проволоку поступает в несколько раз больше энергии, чем необходимо для ее плавления:

$$E_{t_{\text{н}}}^{t_c} \gg 6 W_{\text{пл}}.$$

Если принять, что при этом никаких аномальных явлений не происходит и что теплоемкость вольфрама в жидком состоянии такая же, как в твердом, то энергии $E_{t_{\text{н}}}^{t_c}$ было бы достаточно для плавления и нагревания расплава до температуры, приблизительно в 1,5 раза превышающей температуру кипения. Данных об обычном значении сопротивления вольфрама при такой температуре не имеется, но представляется весьма сомнительным, чтобы оно оставалось очень близким к $R_{\text{пл}}^{\text{тв}}$. В рассматриваемом опыте ток заметно падал с ростом R . Поэтому момент скачка R не может быть точно определен по виду осцилло-

⁸ В этом опыте в контуре 1 вместо катушки самоиндукции L ставилось добавочное сопротивление.

граммы $V_R(t) = i(t) \cdot R(t)$. Для уточнения положения точки t_c здесь использовалось условие $R(t_c) = R_{пл}^{TB}$. Это условие было установлено опытами, в которых i почти не меняется при изменении R .

В приведенных примерах даны результаты опытов с такими j , при которых наблюдалось наибольшее значение избытка энергии $\mathcal{E}_c = E_{t_0}^{t_c} - W_n$. При увеличении плотности тока результаты измерений становились недостаточно надежными благодаря влиянию самоиндукции проводников R и r (см. раздел 1). При снижении j избыток энергии уменьшался. Следовательно, энергия $E_{t_0}^{t_c}$, поступавшая в проволоку к моменту t_c , была различна, если нагревание велось токами различной плотности. С другой стороны, было выяснено, что появление скачков сопротивления в момент t_c определяется изменением dR/dE (а не dE/dt). Таким образом при нагревании металла токами различной плотности изменение зависимости R от E (в момент t_c) происходит при различной E .

Итак, полученные нами данные о характере зависимости R от E при $j \approx 10^7$ А/см² для вольфрама и железа сводятся к следующему. В начале процесса нагревания [начиная с того момента, когда уже можно пользоваться формулами (1) и (2)] никаких аномалий не обнаруживается. Далее, вблизи точки t_n (см. рис. 4) происходит уменьшение dR/dE , причем в момент t_n надежно наблюдается избыток энергии $\mathcal{E}(t_n) = E_{t_0}^{t_n} - W_n$. При $t > t_n$ нарастание избытка энергии продолжается до момента t_c . В момент t_c (при $R \approx R_{пл}^{TB}$) происходит очень резкое возрастание R до исчезновения металлической проводимости. Аномальный характер состояния металла при $t = t_c$ проявляется, в частности, в том, что происходящее в этот момент резкое изменение зависимости R от E (возрастание dR/dE) начинается при различных значениях энергии $E_{t_0}^{t_c}$, если эта энергия вводилась токами различной плотности.

Заметим, что в рассматриваемых экспериментах не было окончательно выяснено, имеются ли аномалии dR/dE при $R < R_{пл}^{TB}$. Поскольку совпадение $R(t_n)$ с $R_{пл}^{TB}$ установлено только с точностью $\sim 10\%$, то возможно, что сопротивление достигает величины $R_{пл}^{TB}$ не в момент t_n , а несколько раньше, при $t = t'$. Минимальное значение для t' может быть определено на осциллограммах из условия $R(t'_{мин}) = 0,9 R(t_n)$. При наибольшей плотности тока, с которой производились наши опыты (в случае вольфрама при колебательном разряде $j(\tau/4) \approx 15 \cdot 10^6$ А/см² и при апериодическом разряде $j \approx 10^7$ А/см²), в момент $t_{мин}$ регулярно наблюдался избыток энергии $\mathcal{E}(t'_{мин}) = E_{t_0}^{t'_{мин}} - W_n \approx 0,2 W_n$. Однако этот избыток энергии исчезал при уменьшении j всего в 1,5—2 раза. Ввиду быстрого увеличения трудностей измерения при переходе к большим j остается некоторое сомнение, что наблюдение избытка энергии при $t = t'_{мин}$ связано с появлением систематической ошибки, возрастающей вместе с плотностью тока. Обнаружить такую ошибку не удалось, но не имеется и контрольного опыта, показывающего, что она не существует.

4. Замечания об измерении энергии по осциллограммам и о потерях энергии

Может возникнуть опасение, что наши выводы относительно особенностей состояния в момент t_c являются результатом неверного определения энергии или того, что избыток энергии $\mathcal{E}_c = E_{t_0}^{t_c} - W_n$ рассеивается проволокой до момента t_c .

Для выяснения вопроса о потерях важно установить, определяется ли избыток энергии величиной объема исследуемой проволоки или величиной ее поверхности. В табл. 1 приведены результаты измерения энергии $E_{t_0}^{t_c}$ для проволок различного диаметра, причем плотность тока $j(t)$ во всех этих случаях мало различалась в течение всего времени $t_c - t_0$ (значения j при $t = \tau/4$ и $t = 3\tau/4$ и величина периода разряда τ приведены в таблице). При всех диаметрах скачок сопротивления довольно точно происходил в один и тот же момент $t_c = 3\tau/4$.

Таблица 1

№ опыта	Длина проволоки в см	Радиус проволоки в мм	Период разряда τ в сек.	$j\left(\frac{\tau}{4}\right)$ А/см ²	$j\left(\frac{3\tau}{4}\right)$ А/см ²	$E_{t_0}^{t_c}$ в дж	W_H в дж	$\mathcal{E}_c = E_{t_0}^{t_c} - W_H$
1	1	0,015	$1,1 \cdot 10^{-5}$	$14 \cdot 10^6$	$8,3 \cdot 10^6$	0,25	0,074	0,176
2	1	0,0284	$1,0 \cdot 10^{-5}$	$12,6 \cdot 10^6$	$10,4 \cdot 10^6$	0,84	0,265	0,57
3	1	0,095	$1,0 \cdot 10^{-5}$	$13,4 \cdot 10^6$	$11,1 \cdot 10^6$	11	2,96	8

Таблица 2

$r_3/r_1 = 6,34$	$(r_3/r_1)^2 = 40$	$\mathcal{E}_3/\mathcal{E}_1 = 45$
$r_3/r_2 = 3,35$	$(r_3/r_2)^2 = 11,2$	$\mathcal{E}_3/\mathcal{E}_2 = 14$
$r_2/r_1 = 1,89$	$(r_2/r_1)^2 = 3,6$	$\mathcal{E}_2/\mathcal{E}_1 = 3,2$

В табл. 2 приведены отношения радиусов и квадратов радиусов исследованных проволок, а также соответствующие отношения значений избытка энергии $\mathcal{E}_c$, взятые из табл. 1. Из табл. 2 видно, что $\mathcal{E}_c$ пропорционален объему, а не поверхности проволоки. Следовательно, измеряемый избыток энергии не может быть связан с потерями, величина которых пропорциональна поверхности проволоки.

Правильность подсчета энергии по осциллограммам контролируется тем, что на некоторой стадии нагревания получается обычное значение dR/dE . Можно, однако, предположить, что избыток энергии, измеряемый при дальнейшем нагревании, выделяется вне объема проволоки [т. е. величина $(V_R/V_r)r$ не является ее сопротивлением]. В этом случае вне проволоки должен был бы протекать ток i' такого же порядка, как и внутри нее, ибо $\mathcal{E}_c \approx E_{t_0}^{t_c}$. Но самое существование скачка V_R показывает, что до момента t_c около проволоки не возникает дуги, ток i' которой был бы сравним с полным током i (в наших опытах i порядка сотен или тысяч ампер). При наличии такой дуги, шунтирующей проволоку, скачка V_R возникнуть не может, так как увеличение R приводит к увеличению тока в дуге, а напряжение, падающее на дуге, уменьшается с ростом тока i' . Отсутствие скачка V_R при наличии дуги непосредственно подтверждается опытами с вольфрамовыми проволоками в воздухе. В этих опытах почти сразу после момента t_n вдоль проволоки вспыхивает дуга, причем напряжение V_R падает и в момент t_n уже не возрастает. На рис. 8 приведены осциллограммы, полученные с одинаковых вольфрамовых проволок, при одинаковом токе в масле (1), в воде (2), в канифоли (4) и в воз-

духе (3). На осциллограмме 3 скачка V_R не наблюдается. О том, что падение V_R вблизи t_n в опытах с вольфрамом в воздухе связано с зажиганием дуги, можно судить по характеру осциллограмм $V_R(t)$ в случае колебательного разряда. В момент падения V_R эти осцилло-

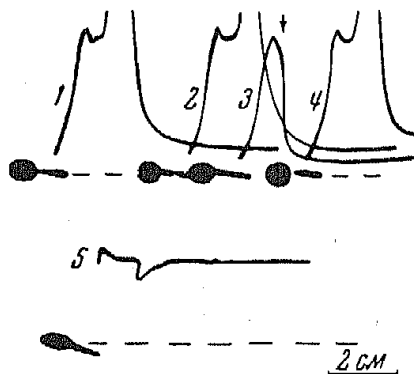


Рис. 8. Осциллограммы вольфрамовых проволок в различных средах. Проволока диаметр 0,1 мм, $l = 1$ см, $j \approx 8 \cdot 10^8$ А/см², $a_R = a_r = 25$ В/мм, $b = 10^{-6}$ сек/мм; 1, 2, 3, 4 — $V_R(t)$; 1 — в масле, 2 — в воде, 3 — в воздухе, 4 — в канифоли, 5 — $V_r(t)$ — в канифоли

граммы приобретают вид, типичный для дуги, такой же, какой имеет осциллограмма 3 рис. 3 после скачка V_R .

Таким образом, предположение, что $\mathcal{E}$ выделяется вне объема проволоки, не оправдывается.

Закключение

Измерения сопротивления и энергии, поступающей в металлические проволоки, показывают, что при токах $\sim 10^7$ А/см² металл переходит в аномальное состояние. В начале процесса нагревания аномалий незаметно, но при приближении R к $R_{пл}^{тр}$ они появляются и в дальнейшем нарастают до момента разрушения проводника. Особенно четко аномалии видны в момент t_c , когда происходит резкое увеличение dR/dE . Для вольфрама и железа в этот момент сопротивление не превышает $R_{пл}^{тр}$, но поступившая энергия $E_{t_0}^{t_c}$ оказывается больше W_n . Величина избытка энергии зависит от плотности тока, которым производилось нагревание.

Заметим, что наши данные находятся в согласии с выводами, к которым пришел автор работы [6] относительно величины энергии, приводящей к изменению состояния металла. Именно энергия, соответствующая излому осциллограмм в точке t_n , необходимая для нагревания металла до $R_{пл}^{тр}$, по данным работы [6], оказывается больше обычной, если $t_n - t_0$ становится меньше $5 \cdot 10^{-6}$ сек. (такой скорости нагревания соответствует $j \approx 10^7$ А/см²). Энергия, поступающая в металл к моменту скачка сопротивления t_c , которая в [6] названа энергией полного испарения, по приведенным в этой работе данным, возрастает при переходе к большим плотностям тока. То же самое наблюдалось и в наших опытах. Но результаты измерения хода сопротивления, полученные в наших опытах, противоречат предположению, высказанному в [6], что возрастание $E_{t_0}^{t_c}$ связано с повышением теплоты испарения благодаря повышению давления вокруг очень быстро испаряющейся проволоки. Действительно, в [6] предполагается, что после t_n сразу начинается быстрое испарение с поверхности, уменьшающее проводящее сечение. Образующиеся пары считаются непроводящими, и момент исчезновения проводящей нити отождествляется с моментом t_c . Ясно, что в таком случае сопротивление должно было бы нарастать не только за счет роста температуры, но и за счет уменьшения проводящего сечения. Наблюдаемое в действительности малое зна-

чение dR/dt и dR/dE в области (t_n, t_c) при этом было бы невозможно.

Мы предполагаем, что наблюдаемые явления свидетельствуют об особом состоянии самого металла при нагревании его током большой плотности. Следует иметь в виду, что обнаруженные нами аномалии могут быть связаны не только непосредственно с большой плотностью тока, но и с тем, что нагревание производится очень быстро.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 июля 1953 г.

Литература

- [1] H. M. Barlow. Phil. Mag., 9, 1044, 1930. — [2] J. A. Anderson. Astrophys. Journ., 51, 37, 1920. — [3] J. A. Anderson и S. Smith. Astrophys. Journ., 64, 295, 1926. — [4] Н. Н. Соболев. ЖЭТФ, 17, 986, 1947. — [5] B. Eiselt. ZS. f. Phys., 132, 54, 1952. — [6] J. Wraпа. Arch. f. Elektrotechn., 33, 656, 1939. — [7] Л. И. Игнатьева и С. Г. Калашников. ЖЭТФ, 22, 385, 1952. — [8] J. A. M. Liempt и J. A. Vriend. ZS. f. Phys., 93, 100, 1934.
-

ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КРИСТАЛЛА NaCl ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

М. С. Чмутин

Исследована зависимость диэлектрической проницаемости кристаллов каменной соли от температуры в диапазоне 15—550°С. Установлено, что при температуре около 500—520°С начинает резко возрастать, причем температурный коэффициент диэлектрической проницаемости $TK\epsilon$ сильно увеличивается. Высказывается предположение, что резкое возрастание ϵ обусловлено увеличением числа «слабо связанных» ионов Na и появлением «слабо связанных» ионов Cl.

Температурный коэффициент диэлектрической проницаемости $TK\epsilon$ вычисляется по константам кристаллической решетки, определяемым через коэффициенты упругой связи и линейного расширения [1]. Общая теория диэлектриков приводит к следующей зависимости ϵ от температуры

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} + \frac{4\pi\theta g}{1 + \omega^2\theta^2} = \epsilon_{\infty} + \frac{4\pi A}{T(1 + \omega^2 B_1^2 e^{2B/T})}. \quad (1)$$

Здесь ω — частота переменного электрического поля. При $\omega \rightarrow \infty$, $\epsilon = \epsilon_{\infty}$; при $\omega \rightarrow 0$, $\epsilon = \epsilon_0$; $\theta = \frac{eV/kT}{2\nu} \cdot \frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_{\infty} + 2}$ — постоянная времени; $g = \frac{n_0 q^2 x^2}{12kT\theta}$ — начальная проводимость; $g\theta = \frac{A}{T}$; $A = \frac{n_0 q^2 x^2}{2k}$; n_0 — число «слабо связанных» ионов в узлах кристаллической решетки; q — заряд иона; x — расстояние, на которое перебрасывается электрическим полем «слабо связанный» ион, — расстояние между двумя смежными узлами решетки, занимаемыми одноименными ионами (тепловая ионная поляризация); ν — частота собственных колебаний иона в решетке; V — местный потенциальный барьер; k — постоянная Больцмана.

Формулой (1) устанавливается зависимость ϵ от T при условии, что $A = \text{const}$. Плавный переход ϵ через максимум в температурном ходе, а также смещение максимума ϵ и его снижение при понижении частоты объясняются теоретически резким уменьшением времени релаксации.

В области невысоких температур до 200—300°С экспериментальных данных о температурной зависимости ϵ достаточно много. Для температурного коэффициента диэлектрической проницаемости кристалла NaCl опыты дают

$$\frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dT} = 3,4 \cdot 10^{-4} \text{ град}^{-1}$$

— значение, весьма близкое к результатам теоретических расчетов. В области высоких температур встречаются значительные экспериментальные трудности. Требуются весьма точные измерения, так как $TK\epsilon$ очень мал. Метод нулевых биений является весьма чувствительным, но обладает тем недостатком, что он непригоден при значительной проводимости диэлектрика. Однако можно ослабить сильное

затухание в этом случае путем подбора измерительного конденсатора малой емкости.

В настоящей работе приводятся результаты измерений по методу биений величины ϵ при изменениях температуры в области 15—550°С. На рис. 1 дана схема измерительного конденсатора. Кристалл K зажимается между нихромовыми электродами (круглые диски) aa при

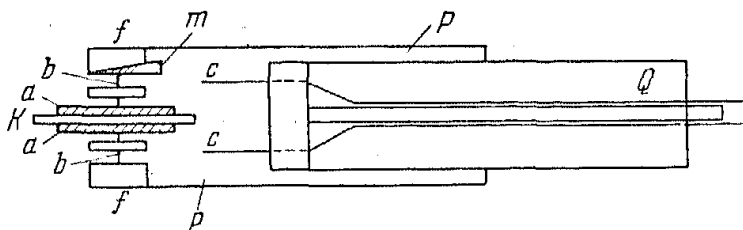


Рис. 1

помощи нихромовых стерженьков bb и клина m из асбоцемента. Нижний на рис. 1 стерженек b имеет упор в боковой стенке основания f , укрепленного на конце пластинки из асбоцемента P ; ползунок Q служит для включения конденсаторов в цепь колебательного контура. При смещении его влево слегка изогнутые концы cc нихромовых проводов надвигаются на стерженьки bb , ползунок Q давит на них своим весом и этим обуславливает надежные контакты.

Измерительный конденсатор помещался в середине муфельной печи размерами $32 \times 20 \times 13$ см³. При меньших размерах печи обнаружилось влияние на емкость ее стенок. Ползунок Q правым концом выходил через отверстие в дверце печи наружу. Таким же путем вводилась в печь термопара фехраль — алюмель, вделанная в оправу из асбоцемента и проградуированная по гальванометру МПБ-46.

Эталонный измерительный конденсатор позволял делать отсчеты с точностью до 0,05 pF; один из электродов всегда был заземлен. Питание генераторов и усилителя было от батарей аккумуляторов. Каждая серия измерений с одним образцом занимала 3,5—4 часа. Для лучшего приближения к стационарному режиму при большой тепловой инерции печи требовались значительные промежутки времени. Критерием стационарности теплового режима служило постоянство частоты биений: самое малое изменение стационарности сказывалось в том, что тон звука телефона начинал непрерывно меняться.

Расчет величины ϵ производился на основании формулы Кирхгофа:

$$C = \frac{\epsilon R^2}{4d} + \frac{\epsilon R}{4\pi} \left(\ln \frac{16\pi R}{d} - 3 + \frac{4}{\epsilon} \right),$$

$$\epsilon = (C - 0,318R) / \left[\frac{R^2}{4d} + 0,0796R \left(\ln \frac{50,265R}{d} - 3 \right) \right].$$

Результаты одного из первых опытов представлены на рис. 2. В этом случае электроды были никелевые, диаметром $D = 2,20$ см. Пластина кристалла NaCl имела толщину $d = 0,21$ см.

Зависимость $\epsilon = f(T)$ была исследована при частоте f_1 порядка $(1-1,5) \cdot 10^6$ гц. Непосредственное соприкосновение кристалла NaCl с поверхностью электродов при высоких температурах обуславливало

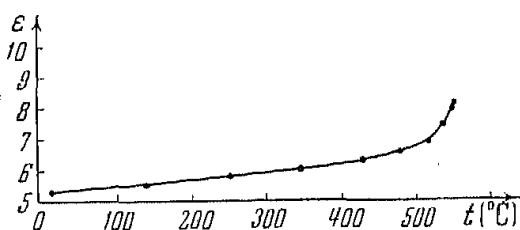


Рис. 2

образование слоя соединений металла с хлором, что портило поверхность электродов. После ряда опытов было установлено, что введение

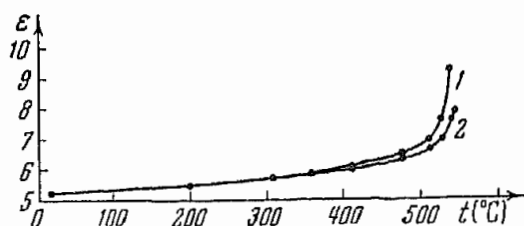


Рис. 3

тонкой (0,02—0,03 мм) слюдяной прокладки между кристаллом и электродами заметных искажений не вносит. Все последующие опыты производились с такой прокладкой. По рис. 2 при $t > 544^\circ$ видно, что затухание так велико, что колебания прекращаются.

На рис. 3 представлены результаты измерений с образцом $d = 0,185$ см при никромовых электродах $D = 2,51$ см и слюдяных прокладках. Кривая 1 снята при частоте f_1 ; $\epsilon = (C - 0,400)/2,407$. Сопоставление рис. 2 и 3 приводит к следующему выводу: колебания при частоте f_1 исчезают при одинаковых условиях, но при частоте f затухание слегка ослаблено — подключение значительной емкости в измерительном колебательном контуре ведет к заметному увеличению полной колебательной энергии, т. е. к понижению декремента колебаний. В последующих опытах он был понижен за счет уменьшения емкости измерительного конденсатора. Из рис. 3 следует, что до $t \approx 400^\circ$ зависимость ϵ от T близка к линейной, при этом $\frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dT} = 3,5 \cdot 10^{-4}$. Резкое увеличение начинается в области $500—520^\circ\text{C}$. На рис. 4, 5 даются результаты измерений с электродами диаметром $D = 1,545$ см для нескольких образцов NaCl и одного образца пьезокварца. (Подобная зависимость наблюдалась и у CaCO_3).

На рис. 4 точками отмечены значения ϵ для образца кристалла NaCl, толщиной $d = 0,290$ см, $\epsilon = (C - 0,246)/0,631$;

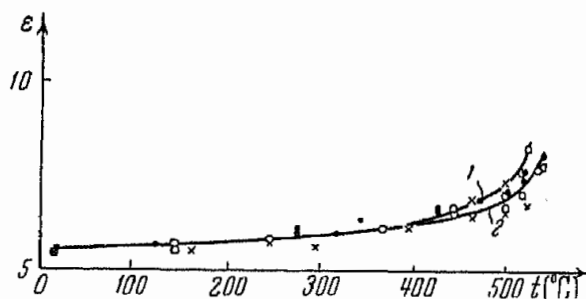


Рис. 4

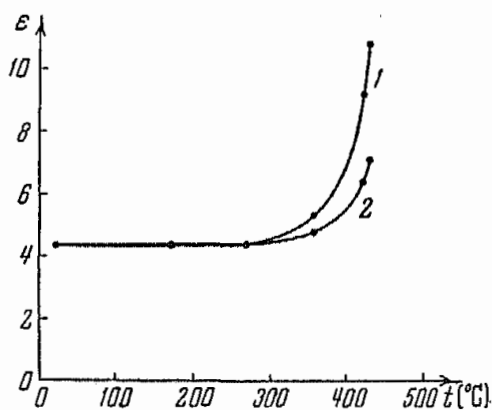


Рис. 5

кружками — для $d = 0,160$ см, $\epsilon = (C - 0,246)/1,038$; крестами — для $d = 0,155$ см, $\epsilon = (C - 0,246)/1,118$. На рис. 5 представлена зависимость ϵ от температуры для кварца $d = 0,137$ см, $\epsilon = \frac{C - 0,246}{1,252}$. Измерения произведены без слюдяных прокладок.

В табл. 1 приводятся результаты измерений для образца NaCl $d = 0,155$ см.

В области высоких температур результаты опыта несовместимы с требованиями теории. Для NaCl наблюдается резкий излом в температурном ходе ϵ при $t \approx 500^\circ\text{C}$ (для кварца $t \approx 400^\circ$). Выше 500° ϵ растет очень быстро: на интервале $\Delta t = 30^\circ$ ϵ увеличивается в 1,2 раза. При этом $TK\epsilon = \frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dT} = 0,008$, тогда как при температуре $t < 450^\circ$ $TK\epsilon = 0,00035$.

Объяснить этот эффект зависимости ϵ от температуры только временем релаксации $\tau = \Theta$ нельзя по следующим причинам:

Т а б л и ц а 1

Зависимость ϵ от температуры для NaCl при частотах f_1 и $f < f_1$

t °C	f		f_1	
	C (см)	ϵ	C (см)	ϵ
15	6,318	5,43	6,278	5,39
19	6,368	5,47	6,282	5,39
122	6,570	5,65	6,480	5,58
244	6,660	5,74	6,705	5,78
338	6,886	5,93	6,930	5,98
443	7,380	6,37	7,353	6,35
502	7,803	6,75	7,628	6,60
519	8,775	7,64	8,055	6,98
531	9,810	8,55	8,280	7,18
544	11,75	10,30	9,000	7,52
526	9,351	8,13	8,235	7,15
492	7,920	6,85	7,623	6,60
436	7,155	6,18	—	—
431	—	—	7,065	6,10

1) при увеличении температуры T постоянная времени Θ падает резко, но произведение ΘT изменяется с ростом T довольно слабо, электропроводность $g = n_0 q^2 x^2 / 12k\Theta T$, а вместе с ней и ϵ изменяются плавно;

2) при больших T по уравнению (1) ϵ должно уменьшаться.

Наиболее вероятным нужно считать следующее объяснение наблюдаемого эффекта. В формуле (1) $A = n_0 q^2 x^2 / 2k$ предполагалось постоянной величиной, следовательно, число n_0 «слабо связанных» ионов в 1 см³ считается не зависящим от температуры. С этим согласиться нельзя: при повышении температуры энергия ионов возрастает, ее значение непрерывно приближается к высоте местного потенциального барьера V , а следовательно, увеличивается число ионов, «слабо связанных» и «сдуваемых» электрическим полем. Кроме того, увеличение поляризации может возрасти за счет появления «слабо связанных» ионов хлора. При $t < 400^\circ$, как известно, носителями тока являются исключительно ионы натрия (при отсутствии посторонних примесей). При $t = 600^\circ$ в образовании тока участвуют ионы хлора с соотношением 0,1 ионов хлора на 0,9 ионов натрия. Появление «слабо связанных» ионов хлора должно происходить около 500° .

Простая зависимость $g = n_0 q^2 x^2 / 12k\Theta T$ не может считаться удовлетворительной, электропроводность g должна возрастать за счет роста «слабо связанных» ионов натрия и хлора. В формуле (1) не только знаменатель, но и числитель A зависит от температуры, поэтому ϵ растет непрерывно и резко. При повышении температуры на dT относительное увеличение числа «слабо связанных» ионов dn/n в 1 см³ должно быть пропорционально dT , $dn/n = \gamma dT$, где γ зависит от свойств кристалла, $n = Ce^{\gamma T}$. При некоторой температуре $T = T_0$, $n = n'_0 = Ce^{\gamma T_0}$, следовательно, $C = n'_0 e^{-\gamma T_0}$, поэтому $n = n'_0 e^{\gamma(T-T_0)}$.

Соотношение (1) справедливо для $T < T_0$. При $T > T_0$ полное число «слабо связанных» ионов будет $n = n_0 + n'_0 e^{\gamma(T-T_0)}$ и резко возрастает с увеличением температуры, поэтому вместо (1) имеем

$$\epsilon = \epsilon_\infty + q^2 x^2 [n_0 + n'_0 e^{\gamma(T-T_0)}] / 3k(1 + \omega^2 \Theta^2) T,$$

или

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} + 4\pi A \left[1 + \frac{n'_0}{n_0} e^{\gamma(T-T_0)} \right] / (1 + \omega^2 B_1^2 e^{2B/T}). \quad (2)$$

Полученное выражение (2) качественно находится в полном согласии с опытом: при $T > T_0$ ϵ возрастает очень резко.

При пониженной частоте резкое возрастание ϵ начинается при более низкой температуре. Действительно, с увеличением периода колебаний установление поляризации происходит в течение большого промежутка времени (полупериода), поэтому поляризация может развиться полнее и при более низкой температуре. Следует, однако, отметить, что частотная зависимость при высоких температурах требует специальных исследований.

Сталинградский педагогический
институт

Поступила в редакцию
10 апреля 1953 г.

Литература

- [1] Г. И. Ск а н а в и. Физика диэлектриков, М. — Л., 1949.

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

ПРЕВРАЩЕНИЕ ДВУХ ФОТОНОВ В π^0 -МЕЗОН И ОБРАЗОВАНИЕ
 π^0 -МЕЗОНОВ ПРИ КОМПТОН-ЭФФЕКТЕ

А. Я. Темкин

Хорошо известно, что π^0 -мезон не стабилен и распадается на два фотона. Этот процесс изучен и теоретически и экспериментально. Обычно при этом распад π^0 -мезона рассматривают как процесс третьего порядка, идущий через виртуальные состояния с нуклонно-антинуклонными парами (см., например, [1]). Можно, однако, рассматривать этот процесс, вводя феноменологически взаимодействие между псевдоскалярным [2-4] ψ -полем π^0 -мезона и электромагнитным полем с вектор-потенциалом A [5]. Обозначая константу взаимодействия через g , можем записать (в системе единиц, в которой $\hbar = c = 1$) лагранжиан этого взаимодействия в виде

$$L_{\pi^0\gamma} = -g\psi\left(\frac{\partial A}{\partial t} \text{rot } A\right). \quad (1)$$

В области энергий ниже порога образования реальных нуклонно-антинуклонных пар все расчеты при помощи лагранжиана (1) полностью эквивалентны расчетам, в которых никаких новых взаимодействий не вводится.

Очевидно, что взаимодействие (1) приводит и к процессу, обратному распаду π^0 -мезона — превращению двух фотонов в π^0 -мезон. Ниже вычислено эффективное сечение этого процесса. Взаимодействие (1) делает возможным фоторождение π^0 -мезонов на частицах, обладающих только электрическим зарядом. В качестве примера найдено также эффективное сечение рождения π^0 -мезонов на электронах.

Величина константы взаимодействия g , вычисленная по известному из эксперимента времени жизни π^0 -мезона $\tau \approx 5 \cdot 10^{-14}$ сек., оказывается равной (в единицах CGSE)

$$g \sim 10^{-17} \frac{\Gamma^{1/2} \text{ см}^{3/2}}{\text{сек.}} \left[\frac{1}{\mu (\hbar c)^{1/2}} \right], \quad (2)$$

где через $1/\mu$ обозначена комптоновская длина волны π^0 -мезона.

Превращение двух фотонов в нейтральный π -мезон можно, не нарушая общности, рассмотреть для случая, когда трехмерные импульсы фотонов k_1 и k_2 антипараллельны. Вероятность перехода $2\gamma \rightarrow \pi^0$ за единицу времени в единице объема импульсного пространства при этом равна (в естественных единицах)

$$W(2\gamma \rightarrow \pi^0) = 2,25g^2 \frac{k_1 k_2}{V \sqrt{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 + \mu^2}} \delta(k_1 + k_2 - \sqrt{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 + \mu^2}), \quad (3)$$

где $k_1 = |k_1|$, $k_2 = |k_2|$.

Считая, что $k_2 \in \left(\frac{\mu^2}{4k_1} - \frac{\Delta k_2}{2}, \frac{\mu^2}{4k_1} + \frac{\Delta k_2}{2} \right)$, усредним (3) по k_2 . В результате получим

$$w(2\gamma \rightarrow \pi^0) = 0,281g^2\mu^2 / k_1 (\Delta k_2). \quad (4)$$

Соответствующее эффективное сечение равно (в обычных единицах)

$$\sigma(2\gamma \rightarrow \pi^0) = 0,281g^2 (\hbar c \mu)^2 / (\hbar c k_1) (\Delta \hbar c k_2). \quad (5)$$

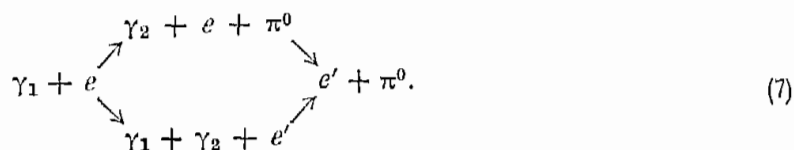
Следует отметить, что проведенное усреднение по k_2 имеет смысл благодаря тому, что энергия π^0 -мезона не является строго определенной величиной, а размазана внутри интервала шириной (см., например, [6])

$$\Gamma \sim \hbar / \tau, \quad (6)$$

где τ — время жизни π^0 -мезона в данной системе отсчета. В системе покоя π^0 -мезона $\Gamma \sim 10^{-1}$ eV.

Рассмотрим численный пример. Пусть $k_1 = \mu/2$, $(\Delta hck_2) \sim 10 \text{ eV} \gg \Gamma$. Тогда полное сечение $\sigma(2\gamma \rightarrow \pi^0) \sim 10^{-27} \text{ см}^2$. Этот пример показывает, что обнаружение превращения двух фотонов в π^0 -мезон, повидимому, находится в пределах экспериментальных возможностей.

Образование π^0 -мезонов при комптон-эффекте может идти следующим образом:



Пусть в выбранной системе отсчета электрон до столкновения покоился. Обозначим через $1/\mu_e$ комптоновскую длину волны электрона, через k — волновой вектор падающего фотона, а через θ — угол между k и импульсом электрона после столкновения. Пренебрегая μ_e по сравнению с μ , найдем дифференциальное эффективное сечение процесса

$$\begin{aligned} d\sigma(\gamma_1 + e \rightarrow e' + \pi^0) &= 18 (eg)^2 \frac{\mu^4}{k} f^2 \times \\ &\times \frac{1}{k - \sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2}} \left\{ 1 + \left[3 \frac{\mu^4}{4k^2} f^2 + \mu_e^2 \right] \frac{1}{\mu_e^2 + (\mu^4/4k^2)f^2} \right\} \times \\ &\times \left[\frac{\mu^2}{2k} f \frac{1}{\sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2}} + \frac{(\mu^2/2k)f - k \cos \theta}{k - \sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2}} \right]^{-1} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{[V(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2 - (\mu^2/2k)f]^2} + \frac{2 + \cos \theta}{[\mu_e - \sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2} - (\mu^2/2k)f]^2} + \right. \\ &\left. + \frac{1}{V^2} \frac{2 + \cos \theta}{\mu_e - \sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2} - (\mu^2/2k)f} \frac{1}{\sqrt{(\mu^4/4k^2)f^2 + \mu_e^2} - (\mu^2/2k)f} \right\} \sin \theta d\theta, \quad (8) \end{aligned}$$

где

$$f = f(\cos \theta) = (\cos^2 \theta - 1)^{-1} \left\{ \cos \theta + \sqrt{1 + (4\mu_e^2/\mu^4) k^2 (\cos^2 \theta - 1)} \right\}. \quad (9)$$

Порог реакции

$$hck_{\text{мин.}} = \frac{hc\mu(\mu + 2\mu_e)}{2\mu_e} \approx \frac{\mu^2 hc}{2\mu_e} = 21 \text{ BeV.}$$

Полное сечение этой реакции оказывается весьма малым. Вблизи порога при $(hck) = 22 \text{ BeV}$ полное сечение

$$\sigma(\gamma_1 + e \rightarrow e' + \pi^0) \sim 10^{-46} \text{ см}^2.$$

В заключение выражаю глубокую благодарность Ю. М. Широкову за внимательное отношение к этой работе.

Поступило в редакцию
15 октября 1953 г.

Литература

- [1] Э. Ферми. Элементарные частицы, ГИИЛ, Москва, 1952. — [2] А. М. Балдин и В. В. Михайлов. ЖЭТФ, 20, 1057, 1950. — [3] Б. Иоффе, А. Рудик и И. Шмушкевич. ДАН СССР, 77, 403, 1951. — [4] В. Б. Берестецкий и И. Я. Померанчук. ДАН СССР, 77, 803, 1951. — [5] R.H. Dalitz. Proc. Phys. Soc., A64, 667, 1951. — [6] Л. Ландау и Е. Лифшиц. Квантовая механика, ч. I, ГИТТЛ, М. — Л., 1948.

К ВОПРОСУ О ЛЮМИНЕСЦИРУЮЩИХ КОМПОНЕНТАХ НЕФТИ

Х. И. Мамедов

Применение люминесцентного анализа в большинстве случаев требует знания тех составных частей исследуемого вещества, которые вызывают его люминесценцию. В этом отношении люминесценция нефти мало исследована. Существует правдоподобное предположение, что люминесценция нефти обусловлена ароматическими соединениями [1]. Однако прямое подтверждение этой точки зрения отсутствует. С другой стороны, высказывается также мнение, что люминесцируют не основные компоненты, а примеси, присутствующие в малых количествах [1]. Несмотря на то что люминесцентный анализ широко применяется в нефтепоисковой работе, вопрос о природе люминесцирующих компонентов остается до сих пор открытым. По нашему мнению, это вызвано, во-первых, тем, что нефть представляет собой многокомпонентную смесь, в которой спектры люминесценции отдельных веществ могут сильно перекрываться. Во-вторых, до сих пор изучалась люминесценция нефтей в видимой области спектра [1, 2], тогда как спектр люминесценции нефти в основном находится в ближней ультрафиолетовой области, только небольшая часть его заходит в видимую область.

Мы поставили своей задачей изучение ультрафиолетовой люминесценции нефтей Азербайджана. Ультрафиолетовые спектры люминесценции образцов нефти фотогра-

фировались при помощи кварцевого спектрографа Хильгера (малая модель). В качестве источника света применялась кварцевая лампа ПРК-4. Раствор нефти в кварцевой кювете помещался непосредственно перед щелью спектрографа без конденсора. Экспозиции на диапозитивных пластинках были порядка 10—20 мин.

С целью обнаружить люминесцирующие компоненты мы применяли различные растворители (эфир, спирт, бензол), а возбуждение производилось светом отдельных линий ртутного спектра. При этом было обнаружено, что при возбуждении светом линии 313 мμ, выделенной при помощи светофильтра ГОИ, в спектре люминесценции отчетливо обнаруживаются четыре максимума, как это видно из рис. 1, представляющего микрофотограмму соответствующего спектра.

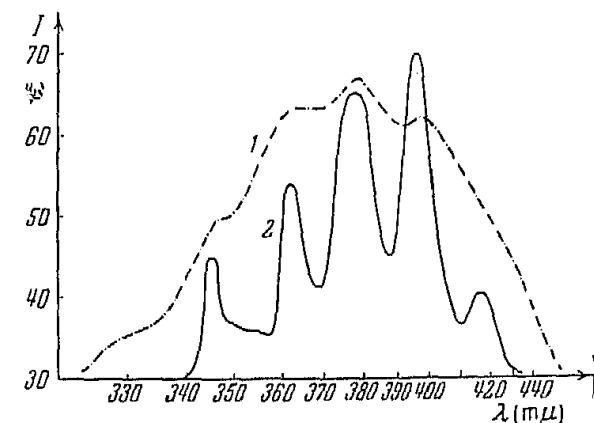


Рис. 2. Микрофотограмма спектров люминесценции растворов: 1 — нефти, 2 — фенантрена в эфире

Максимумы при длинах волн 348, 363, 382, 402 мμ особенно заметны при концентрации $10^{-2}\%$. Сопоставление этих максимумов со спектрами люминесценции ароматических соединений привело к предположению, что они принадлежат фенантрону. С целью проверки этого предположения был отдельно сфотографирован спектр чистого фенантрена в том же растворителе (эфир).

Совпадение соответствующих максимумов (рис. 2) свидетельствует, что при возбуждении $\lambda = 313$ мμ преимущественно возбуждается люминесценция фенантрена, входящего в состав исследованных нефтей. Соотношение интенсивностей в растворе нефти изменено по сравнению с чистым фенантреном. Это и понятно, так как имеет место селективное поглощение света люминесценции фенантрена другими компонентами нефти.

Во время выполнения этой работы появился автореферат диссертации Рахматова [3], который также изучал ультрафиолетовую люминесценцию нефти. Однако полученный им спектр представляет широкую бесструктурную полосу, не позволяющую установить природу люминесцирующих компонентов.

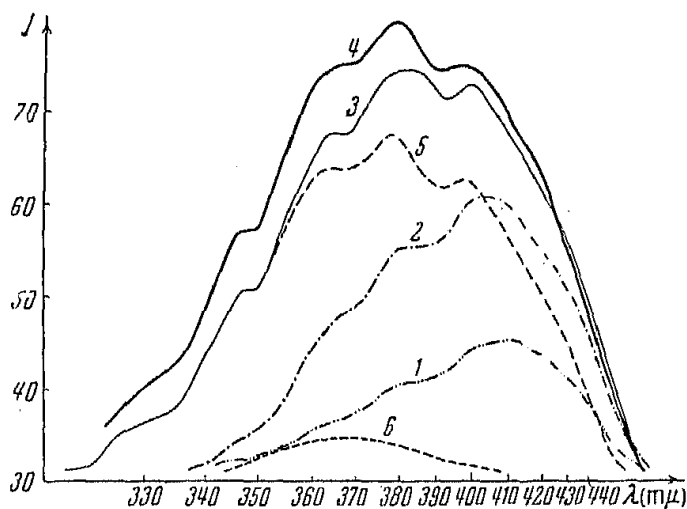


Рис. 1. Микрофотограмма спектров люминесценции растворов нефти в эфире при различных концентрациях: 1 — 30%, 2 — 10%, 3 — 1%, 4 — $10^{-1}\%$, 5 — $10^{-2}\%$, 6 — $10^{-3}\%$

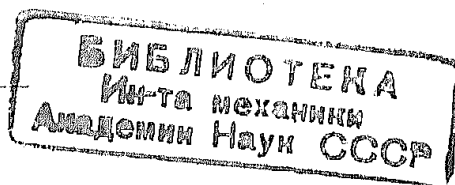
Данная работа выполнена автором в лаборатории люминесценции им. С. И. Вавилова Физического института им. П. Н. Лебедева АН СССР. Автор пользуется случаем выразить благодарность проф. В. Л. Левшину за предоставление возможности провести это исследование в его лаборатории и сотрудникам лаборатории за содействие в работе.

Институт физики и математики
Академии наук Азербайджанской ССР

Поступило в редакцию
3 февраля 1954 г.

Литература

[1] Ф. М. Эфендиев. Люминесцентный метод исследования нефтей и битумов, Азнефтеиздат, 1953.—[2] М. А. Константинова-Шлезингер. Люминесцентный анализ, Изд-во АН СССР, 1948, стр. 177.—[3] М. Н. Рахматов. Автореферат диссертации «К разработке методики люминесцентного анализа нефтепродуктов Узбекистана», 1953.



К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться изложенными ниже правилами. СТАТЬИ, ПРИСЛАННЫЕ БЕЗ СОБЛЮДЕНИЯ ПЕРЕЧИСЛЕННЫХ ПРАВИЛ, К РАССМОТРЕНИЮ РЕДАКЦИЕЙ ПРИНИМАТЬСЯ НЕ БУДУТ.

1. Статьи, являющиеся результатами работ, проведенных в институтах, должны обязательно иметь направление от соответствующего института.

2. Редакция в особенности обращает внимание авторов на то, что статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно.

Статьи объемом свыше 1 печ. листа (т. е. 21—22 стр. текста на пишущей машинке) вообще не допускаются. Как текст, так и графический материал должны представляться обязательно в двух экземплярах.

3. Статья должна иметь краткую аннотацию, указывающую цель и результаты работы. Аннотация и раздел «Выводы» (если таковой имеется в статье) не должны, однако, дублировать друг друга.

4. Статьи должны быть напечатаны на пишущей машинке с одной стороны листа; рукописные вставки не допускаются. Формулы должны быть вписаны четко чернилами. Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы должны быть напечатаны на отдельных от текста страницах.

СТАТЬИ ДОЛЖНЫ БЫТЬ ОБЯЗАТЕЛЬНО ПОДПИСАНЫ АВТОРОМ, А ПРИ НАЛИЧИИ НЕСКОЛЬКИХ АВТОРОВ — ВСЕМИ СОАВТОРАМИ

5. Во избежание недоразумений и ошибок следует делать ясное различие между заглавными и строчными буквами в формулах. В тех случаях, когда заглавные и строчные буквы одинаковы по начертанию и отличаются только своим размером (*V* и *v*, *U* и *u*, *W* и *w*, *O* и *o*, *K* и *k*, *S* и *s*, *I* и *i*, *C* и *c*, *P* и *p*), необходимо заглавные буквы подчеркивать снизу двумя черточками (например, S), а строчные помечать двумя черточками сверху (например, s). Необходимо делать различие между *O* (большой), *o* (малой) и *0* (нулем) для чего букву *O* и *o* подчеркивать двумя черточками: O и o, а нуль оставлять без подчеркивания. Необходимо также различать буквы *I* и *J*, для чего в рукописи букву *I* писать как римскую единицу с точкой вверх. Греческие буквы должны подчеркиваться красным карандашом. Векторы подчеркивать синим или черным карандашом.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи, с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой над строкой, в прямых скобках (например, [1]). Цитируемая литература должна быть оформлена в следующем порядке: а) для журнальных статей указываются инициалы и фамилия авторов, название журнала, номер тома (подчеркнуть снизу), страница и год; б) для книг надо указывать инициалы и фамилию авторов, полное название книги, год и место издания (для книг иностранного происхождения — указывать данные русского перевода, если таковой имеется).

7. Все рисунки и чертежи должны быть представлены отдельно от рукописи и ни в коем случае не должны приклеиваться к оригиналу. Рисунки желательно снабжать разъясняющими подписями, которые должны быть собраны на отдельном листе. На обороте рисунков должны быть указаны фамилия автора, название статьи и номер рисунка. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами или буквенными обозначениями в подписи к рисунку или в тексте.

Редакция просит авторов ограничиваться минимальным числом рисунков к статьям.

8. Редакция просит авторов отмечать на полях рукописи места, которые могут быть набраны петитом.

9. Редакция посылает автору одну корректуру. Изменения и дополнения в тексте не допускаются. Корректурa с подписью автора должна быть выслана обратно в редакцию в течение суток с момента ее получения.

10. К рукописи должен быть приложен точный адрес, фамилия, имя и отчество автора, а также номер телефона, служебного или домашнего (для авторов, проживающих в Москве).

11. РУКОПИСИ, НЕ ПРИНЯТЫЕ РЕДАКЦИЕЙ, АВТОРУ НЕ ВОЗВРАЩАЮТСЯ.

Адрес редакции, Москва, Подсосенский пер., 21, Изд-во АН СССР.

Цена 12 руб.

40
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ
ИНСТИТУТ МЕХАНИКИ
АН СССР
4 2.12 1973