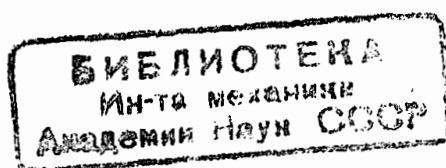


735

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 27

Вып. 4 (10)



ОКТАБРЬ 1954 г.

ИЗДАТЕЛЬСТВО АКАДЕМИИ НАУК СССР
МОСКВА

И. С. Шапиро. Распад на частицы с нулевой массой покоя.	393
С. И. Пекар. Теория сильной связи частицы (нуклона) с мезонным полем . . .	398
С. И. Пекар. Свободно движущийся нуклон	411
Н. Ф. Нелипа. Квантовая теория светящегося электрона. II.	421
А. П. Юцис, В. В. Кибартас и И. И. Глембоцкий. Решение упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении для атомов типа бериллия	425
Н. Г. Басов и А. М. Прохоров. Применение молекулярных пучков для радиоспектроскопического изучения вращательных спектров молекул	431
Н. Н. Порфирьева. Расчет спектра собственных предельных частот смешанных молекулярных кристаллов при различной концентрации компонентов	439
В. Т. Хозяинов. Образование мезонов при периферических столкновениях нуклонов.	445
З. В. Жидкова. Спектры отражения окрашенных рассеивающих объектов. I . . .	458
О. П. Гирин и Б. И. Степанов. Спектры отражения окрашенных рассеивающих объектов. II.	467
И. С. Фролов. Показатель преломления воды и водных растворов сернистого натрия в области метровых волн.	477
С. В. Лебедев. Нарушение закона Богуславского — Лэнгмюра при нагревании вольфрамового катода вакуумной лампы импульсом тока большой плотности	487

Дискуссии

В. И. Скобелкин. О теории автогенезиса Н. С. Акулова.	501
В. Н. Кессених. Ответ на статью В. Л. Гинзбурга по поводу книги «Распространение радиоволн».	510
В. Л. Гинзбург. О старых и новых ошибках В. Н. Кессениха	517
Э. Е. Вайнштейн, Р. Л. Баринский и К. И. Нарбутт. К теории рентгеновских спектров поглощения.	521

Главный редактор *Н. Н. АНДРЕЕВ*

Зам. главного редактора *М. М. СУЩИНСКИЙ*

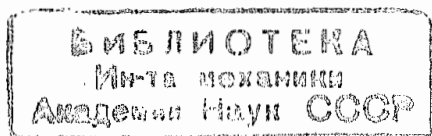
Редколлегия

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 11/XI 1954 г. Т-06287 Формат бум. 70×108^{1/16}. Бум. л. 4^{1/4}
Печ. лист. 11,64+1 вкл. Уч.-изд. л. 12,8 Тираж 3100 экз. Зак. 625

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

735



РАСПАД НА ЧАСТИЦЫ С НУЛЕВОЙ МАССОЙ ПОКОЯ

И. С. Шапиро

Получены правила отбора для распада частицы на две частицы с произвольными спинами, из которых по крайней мере одна обладает нулевой массой покоя.

1. Введение

Ландау [1] было установлено наличие специфических правил отбора для случая распада частицы или системы частиц на два фотона. Этот же вопрос рассмотрен в работах [2-4], в которых, кроме того, исследована взаимная поляризация фотонов. Настоящая работа посвящена отысканию правил отбора для распада на две частицы с произвольными спинами при условии, что по крайней мере одна частица имеет нулевую массу покоя. Для решения задачи используется метод, близкий к развитому в [2,3]. Везде в дальнейшем единицы выбраны так, что $\hbar = c = 1$.

Волновая функция ψ частицы с данным импульсом $\mathbf{p}$, параллельным оси квантования (оси Z), может быть записана в виде произведения спиновой χ и координатной φ функций:

$$\psi(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \rho) = \chi_{sm}(\rho) \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = u(p_z) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad (1)$$

где s — спин частицы, ρ — спиновая переменная, m — проекция спина на ось Z . Для частиц с отличной от нуля массой покоя $\chi_{sm} \neq 0$ при всех возможных значениях m , равных $-s, -s+1, \dots, +s$. Для частиц с равной нулю массой покоя $\chi_{sm} \neq 0$ только при

$$m = \pm s, \quad (2)$$

так как в этом случае, независимо от величины спина, существуют лишь два состояния с данным импульсом (см. [5]). Волновая функция (1) представляет собой суперпозицию состояний с различными угловыми моментами и полной проекцией момента на ось Z , равной m [координатная часть $\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ при нашем выборе оси Z от азимутального угла сферической системы координат не зависит].

Волновая функция Ψ_M системы из двух частиц с равными по абсолютной величине и противоположными по знаку импульсами и данным значением проекции углового момента M на направление разлета частиц имеет $(2s_1+1)(2s_2+1)$ компонент и может быть разбита на $2s_1+1$ неприводимых частей (считаем $s_1 \leq s_2$) Ψ_{SM} , соответствующих различным возможным значениям суммарного спинового числа S :

$$\Psi_M(1, 2) = \sum_{|s_1-s_2|}^{s_1+s_2} \alpha_S \Psi_{SM}(1, 2), \quad (3)$$

$$\Psi_{SM}(1, 2) = X_{SM}(1, 2) \Phi_S(1, 2). \quad (4)$$

В уравнениях (3), (4) цифрами 1, 2 обозначены совокупности переменных первой и второй частиц, символами X_{SM} , Φ_S — спиновая и пространственные части функции Ψ_{SM} . Спиновая функция системы X_{SM} находится при помощи известной формулы Клебша—Жордана:

$$X_{SM}(1, 2) = \sum_{m_1} (SM | s_1 m_1 s_2 m_2) \chi_{s_1 m_1}(1) \chi_{s_2 m_2}(2), \quad (5)$$

где

$$m_2 = M - m_1,$$

$\chi_{s_1 m_1}(1)$, $\chi_{s_2 m_2}(2)$ — спиновые функции каждой из частиц, и $(SM | s_1 m_1 s_2 m_2)$ — коэффициенты Клебша—Жордана. Функция $\Phi_S(1, 2)$ зависит лишь от разностей координат частиц:

$$\Phi_S(1, 2) = \Phi_S(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad (6)$$

и, если перейти к сферическим координатам, не будет зависеть от азимутального угла (ось Z параллельна направлению разлета частиц).

При распаде на две тождественные частицы волновая функция $\Psi_M(1, 2)$ в зависимости от рода квантовой статистики должна быть либо симметрична, либо антисимметрична относительно перестановки переменных 1, 2. В этом случае свойства перестановочной симметрии функций $X_{SM}(1, 2)$ и $\Phi_S(1, 2)$ должны быть определенным образом связаны друг с другом. Перестановочная симметрия спиновой функции при $s_1 = s_2$ определяется соотношением между коэффициентами Клебша—Жордана:

$$(SM | s m_1 s m_2) = (-1)^{2s-S} (SM | s m_2 s m_1), \quad (7)$$

откуда следует, что

$$X_{SM}(1, 2) = (-1)^S X_{SM}(2, 1), \quad (8)$$

если s — целое число, и

$$X_{SM}(1, 2) = (-1)^{S+1} X_{SM}(2, 1), \quad (9)$$

если s — полуцелое число. Соответственно этому свойства перестановочной симметрии $\Phi(1, 2)$ при любых S выражаются уравнением:

$$\Phi_S(1, 2) = (-1)^S \Phi_S(2, 1). \quad (10)$$

Так как, согласно (6),

$$\Phi_S(2, 1) = \Phi_S(-\mathbf{r}),$$

то уравнение (10) можно переписать в форме:

$$\Phi_S(\mathbf{r}) = (-1)^S \Phi_S(-\mathbf{r}). \quad (11)$$

Иначе говоря, при распаде на две тождественные частицы функция $\Phi_S(\mathbf{r})$ четна или нечетна в зависимости от четности или нечетности суммарного спинового числа S . В связи с этим отметим, что в разложении $\Phi_S(\mathbf{r})$ по полиномам Лежандра P_l содержатся лишь те полиномы, для которых четность l совпадает с четностью S .

Для нахождения искомых правил отбора мы должны теперь перечислить все возможные состояния систем указанного выше типа. В случае распада на две тождественные частицы эту задачу удобно решать раздельно для статистик Бозе (§ 2) и Ферми (§ 3). В § 4 рассматривается распад на две различные частицы.

2. Распад на два тождественных бозона с нулевой массой покоя

На основании уравнения (11) для четности волновой функции системы можем написать:

$$\xi = (-1)^S, \quad (12)$$

поскольку спиновая функция X_{SM} для двух тождественных частиц с целым спином всегда четная, так что ξ совпадает с четностью функции Φ_S . Согласно уравнению (2), проекция углового момента системы M может принимать для рассматриваемых здесь и в § 3 случаев три значения:

$$M = 0, \pm 2s. \quad (13)$$

Заметим теперь, что при повороте оси Z на 180° функция $\Psi_{SM}(1, 2)$ остается неизменной при $M = 0$. В самом деле, спиновая функция X_{SM} преобразуется при поворотах по неприводимому представлению группы вращений D_S . Следовательно, при рассматриваемом преобразовании

$$X_{SM} \rightarrow (-1)^{S-M} X_{S, -M} \quad (14)$$

и, при $M = 0$,

$$X_{S0} \rightarrow (-1)^S X_{S0}. \quad (15)$$

Функция Φ_S преобразуется при этом по закону:

$$\Phi_S \rightarrow (-1)^S \Phi_S. \quad (16)$$

Соотношениями (4), (15) и (16) высказанное утверждение доказано. Теперь легко обнаружить, что состояния с четными S и $M = 0$ представляют собой суперпозиции состояний только с четными полными угловыми моментами. Действительно, если полный момент J нечетен, то при вращении оси Z на 180° функция Ψ_{S0}^J изменит знак, так как при этом преобразовании всякая функция с $M = 0$, преобразующаяся по неприводимому представлению группы вращений D_J , приобретает множитель $(-1)^J$. Поскольку, однако, согласно доказанному выше, Ψ_{S0} не меняет знака при повороте оси Z на 180° , нечетные моменты невозможны. Итак, учитывая (12), можем сказать:

а) при четных S и $M = 0$ возможны лишь четные ($\xi = +1$) состояния с четным полным моментом $J \geq 0$.

Для нечетных S , M всегда равно нулю, причем, согласно (12), $\xi = -1$. Следовательно:

б) при нечетных S возможны лишь нечетные ($\xi = -1$) состояния с четным полным моментом $J \geq 0$.

В случае $M = \pm 2s$ ограничения, накладываемые преобразованием поворота оси Z на 180° , отпадают и

в) при $S = 2s$, $M = \pm 2s$ возможны лишь четные ($\xi = +1$) состояния с полным моментом $J \geq 2s$.

Сводя вместе полученные выше результаты, заключаем, что распад на два тождественных бозона с равной нулю массой покоя и спином s запрещен абсолютно, если

I) спин распадающейся частицы нечетен и меньше $2s$;

II) спин распадающейся частицы нечетен и ее волновая функция также нечетна.

В частном случае $s = 1$ из I) и II) получаются правила отбора для двухфотонного распада, содержащиеся в работах [1-4].

3. Распад на две тождественные частицы с полуцелым спином и нулевой массой покоя

Рассматривая распад на две частицы с полуцелым спином, мы прежде всего должны фиксировать представление, по которому преобразуется волновая функция спинорного поля при инверсии пространственных осей координат. Если обозначить матрицу, преобразующую спинор при инверсии осей, через T , то, как хорошо известно (см. [6,7]), возможны два случая:

$$T^2 = +1, \quad (17)$$

$$T^2 = -1. \quad (18)$$

Легко показать при помощи метода, использованного в [8], что в случае (18) спиновая функция X_{SM} всегда нечетная, а в случае (17) всегда четная. Учитывая этот факт, а также уравнение (11), получаем для четности ξ волновой функции Ψ_{SM} всей системы следующий результат:

$$\xi = (-1)^S, \quad (19)$$

если имеет место уравнение (17), и

$$\xi = (-1)^{S+1}, \quad (20)$$

если справедливо соотношение (18). Для определенности рассмотрим вначале именно этот последний случай. Тогда, используя соотношения (15), (16) и (20), придем к следующим результатам:

а) при четных S возможны лишь нечетные ($\xi = -1$) состояния с четным полным моментом $J \geq 0$;

б) при нечетных S и $M = 0$ возможны лишь четные ($\xi = +1$) состояния с четным полным моментом $J \geq 0$;

в) при $S = 2s$, $M = \pm 2s$ возможны лишь четные ($\xi = +1$) состояния с полным моментом $J \geq 2s$.

Резюмируя содержания пунктов а), б), в), мы снова приходим к правилам отбора, сформулированным в предыдущем параграфе. Если волновые функции частиц с полуцелым спином преобразуются при инверсии по представлению (17), то в пунктах а), б), в) следует изменить знаки у ξ на обратные. Правило отбора I) останется при этом неизменным, тогда как вместо правила II) получим:

IIa) распад на две тождественные спинорные частицы типа (17) с нулевой массой покоя запрещен абсолютно для частиц с нечетным полным моментом и четной волновой функцией. Заметим, что при $s = 1/2$ полученные правила отбора остаются справедливыми и для распада на частицы с отличной от нуля массой покоя, так как в этом случае уравнение (2) справедливо всегда.

4. Распад на две нетождественные частицы

Если образующиеся в результате распада частицы различны, то единственным дополнительным ограничением является связанное с нулевой массой покоя условие (2).

Обозначим через s_1 , s_2 спины частиц — продуктов распада. Тогда, используя условие (2), сразу же получаем:

III) распад на две частицы, из которых по крайней мере одна (со спином s_1 , $s_1 > s_2$) обладает нулевой массой покоя, запрещен абсолютно, если спин распадающейся частицы меньше, чем $s_1 - s_2$.

В частном случае, когда одна из частиц является фотоном, а вторая — бозоном со спином нуль, из III) следует правило отбора, ука-

занное в [3]: для частицы со спином нуль распад на один фотон и бозон со спином нуль невозможен.

Отметим, что полученные в данной работе строгие правила отбора могут быть использованы в качестве приближенных правил, если имеет место распад на частицы с отличной от нуля массой покоя, но с крайне релятивистскими энергиями. Тогда в случаях, предусмотренных правилами отбора I), II), III), вероятность распада будет мала, и, следовательно, время жизни распадающейся частицы будет велико.

Московский государственный
университет

Поступила в редакцию
19 января 1954 г.

Литература

- [1] Л. Д. Ландау. ДАН СССР, 60, 207, 1948. — [2] C. N. Yang. Phys. Rev., 77, 242, 1950. — [3] D. C. Peaslee. Helv. Phys. Acta, 23, 845, 1950. — [4] Ю. М. Широкоев. ЖЭТФ, 24, 14, 1953. — [5] M. Fierz. Helv. Phys. Acta, 12, 3, 1939. — [6] Г. Ф. Жарков. ЖЭТФ, 20, 493, 1950. — [7] И. С. Шапиро. ЖЭТФ, 22, 524, 1952. — [8] И. С. Шапиро. ДАН СССР, 95, 975, 1954.
-

ТЕОРИЯ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ ЧАСТИЦЫ (НУКЛОНА) С МЕЗОННЫМ ПОЛЕМ

С. И. Пекар

Рассмотрена частица, сильно взаимодействующая с полем заряженных и нейтральных мезонов. Развита метод и математический аппарат, аналогичные применяющимся в теории поляронов. Получены основные уравнения, определяющие самосогласованные состояния частицы в потенциальной яме, образованной мезонным полем. Получен гамильтониан системы, упрощенный в результате применения приближенных методов.

1. Введение

В современной мезодинамике при рассмотрении вопросов, связанных с взаимодействием между нуклонами и мезонным полем, наиболее популярным является метод возмущений, т. е. разложение по степеням константы взаимодействия, которая предполагается малой. Однако в случае π -мезонов, представляющем наибольший интерес для мезонной теории ядерных сил, эта константа оказывается не так мала, как хотелось бы, а вышеупомянутые разложения обычно расходятся. Часто получаются расходящиеся результаты, не допускающие перенормировки, или результаты, противоречащие опыту. Сама законность разложения по степеням константы взаимодействия вызывает некоторые сомнения. Таким образом в мезодинамике метод возмущений не дает столь удовлетворительных результатов, как, например, в электродинамике. Поэтому представляет некоторый интерес рассмотрение противоположного предельного приближения, основанного на предположении сильного взаимодействия между нуклонами и мезонным полем. Такое приближение было развито в ряде работ [1-3] и сводится к разложениям по обратным степеням константы взаимодействия. Однако и это приближение сильной связи не привело к удовлетворительным результатам, и дальнейшие попытки создания приближенных методов в мезодинамике продолжают представлять интерес.

Настоящей статьей начинается публикация ряда работ, в которых делаются попытки применить в мезодинамике методы теории поляронов [4-9]. Предполагается, что частица, условно именуемая в дальнейшем нуклон, создает вокруг себя некоторое мезонное поле. Последнее, обладая значительной инерционностью, не успевает принимать статическую форму для каждого мгновенного положения движущегося нуклона. Поэтому созданное нуклоном мезонное поле само становится источником силы, действующей на нуклон. Эта реакция поля предполагается настолько большой, что образует для нуклона глубокую потенциальную яму, в которой он локализуется на дискретном энергетическом уровне. Далее предполагается, что движение нуклона в яме столь быстрое, что наиболее низкочастотная часть колебаний мезонного поля почти не успевает следовать за этим движением, а представляет собой приблизительно квазистатическое поле Ψ -облака нуклона. Образуется самосогласованное состояние, в котором форма мезонного поля определяется видом Ψ -функции нуклона. Ψ -функция нуклона, в свою очередь, определяется формой мезонного поля. Такое состояние аналогично полярону [4]. Вышеописан-

ное самосогласованное образование, как целое, может совершать поступательное и вращательное движение, при котором перемещается мезонная потенциальная яма, унося в себе быстро осциллирующий нуклон.

Ниже не применяется разложение ни по степеням константы взаимодействия, ни по степеням обратной константы взаимодействия. Для выполнения критериев предлагаемого метода необходимо, чтобы связь была сильной, однако сам метод отличается от ранее опубликованных методов сильной связи [1-3].

2. Исходные уравнения и предположения

Гамильтониан мезонного поля без источников записывается в обычном виде:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \int \left[\frac{\pi_\alpha^2}{c^2} + (\vec{\nabla} \varphi_\alpha)^2 + \mu^2 \varphi_\alpha^2 \right] d\tau. \quad (1)$$

Здесь все φ_α и π_α вещественны: φ_1 и φ_2 — поля заряженных мезонов, а φ_3 — поле нейтральных мезонов; π_α — поля, канонически сопряженные с φ_α . Масса положительных, отрицательных и нейтральных мезонов предполагается одинаковой и равной $m_\pi \cdot \mu = m_\pi c/\hbar$. Вводя полную систему функций

$$\chi_{\vec{x}}^{\pm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L^3}} \begin{cases} \cos \vec{x} \cdot \mathbf{r}, & \text{при } x_r \leq 0, \\ \sin \vec{x} \cdot \mathbf{r}, & \text{при } x_r > 0, \end{cases} \quad (2)$$

ортонормированных в объеме L^3 , можно φ_α и π_α разложить в ряды Фурье:

$$\varphi_\alpha = \sum_{\vec{x}} \varphi_{\alpha\vec{x}} \chi_{\vec{x}}^+(\mathbf{r}), \quad (3)$$

$$\pi_\alpha = \sum_{\vec{x}} \pi_{\alpha\vec{x}} \chi_{\vec{x}}^+(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Тогда, полагая

$$\omega_{\vec{x}} = c \sqrt{\mu^2 + \vec{x}^2} \quad (\omega_{\vec{x}} > 0) \quad (5)$$

и вводя безразмерные канонически сопряженные величины

$$q_{\alpha\vec{x}}^{\pm} = \varphi_{\alpha\vec{x}} \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\omega_{\vec{x}}}{\hbar}}, \quad g_{\alpha\vec{x}}^{\pm} = \pi_{\alpha\vec{x}} \frac{1}{c \sqrt{\hbar \omega_{\vec{x}}}}, \quad (6)$$

гамильтониан мезонного поля можно переписать в виде:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{x}, \alpha=1}^3 \hbar \omega_{\vec{x}} \left[g_{\alpha\vec{x}}^2 + q_{\alpha\vec{x}}^2 \right]. \quad (7)$$

Обычные условия квантования имеют вид

$$[q_{\alpha\vec{x}}, q_{\alpha'\vec{x}'}] = [g_{\alpha\vec{x}}, g_{\alpha'\vec{x}'}] = 0; \quad [q_{\alpha\vec{x}}, g_{\alpha'\vec{x}'}] = i \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{x}\vec{x}'}. \quad (8)$$

Выберем такое представление, в котором $q_{\alpha\vec{x}}^{\pm}$ являются обычными числами (обобщенными координатами мезонного поля). Тогда $g_{\alpha\vec{x}}^{\pm}$ мож-

но представить дифференциальными операторами

$$g_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} = -i\partial/\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}. \quad (9)$$

Предположим, что гамильтониан нуклона в отсутствие мезонного поля есть $\hat{E}_0$. Можно, в частности, принять, что он имеет обычный дираковский вид

$$\hat{E}_0 = -i\hbar c(\vec{\alpha}, \vec{\nabla}) + mc^2\alpha_4, \quad (10)$$

где $\vec{\alpha}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ и α_4 — известные четырехрядные матрицы, а m — масса нуклона. Предположим, что помимо пространственных координат и спина нуклон имеет еще «зарядовую» степень свободы и может находиться в двух квантовых состояниях: в протонном состоянии, в котором его заряд равен $+e$ и которое ниже будет обозначаться индексом p , и в нейтронном состоянии, в котором его заряд равен нулю и которое будет обозначаться индексом n . Переходы из первого состояния во второе, и обратно, возможны только вследствие взаимодействия с заряженными мезонами.

Пусть $e\tau_0$ — оператор заряда нуклона, а Q_p и Q_n — собственные функции этого оператора. Принимая последние за базис двумерного векторного пространства, можно τ_0 представить двурядной матрицей $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$. Операторы возникновения и исчезновения заряда определяются, как обычно:

$$\begin{aligned} \tau_+ Q_n &= Q_p, & \tau_- Q_p &= Q_n; \\ \tau_+ Q_p &= 0, & \tau_- Q_n &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

и могут быть представлены матрицами

$$\tau_+ = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \tau_- = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Произвольное состояние системы может быть разложено по собственным функциям оператора заряда:

$$\Psi_{\nu} = Q_p \Psi_{1\nu}(\mathbf{r}, \dots, q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}, \dots) + Q_n \Psi_{2\nu}(\mathbf{r}, \dots, q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}, \dots), \quad (12)$$

где коэффициенты разложения $\Psi_{1\nu}$ и $\Psi_{2\nu}$ не зависят от степени свободы, связанной с зарядом, но зависят от остальных степеней свободы, т. е. от обобщенных координат мезонного поля $q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$, от пространственных координат нуклона $\mathbf{r}$ и от его спина ν ($\nu = 1, 2, 3, 4$).

Взаимодействие между нуклоном и мезонным полем выбирается в виде

$$\hat{H}' = -V4\pi \sum_{\alpha=1}^3 g_{\alpha} \tau_{\alpha} \{\hat{A}_{\varphi_{\alpha}}(\mathbf{r}), \hat{L}\}, \{\hat{A}_{\varphi_{\alpha}}, \hat{L}\} \equiv \sum_{\beta} (\hat{A}_{\beta} \varphi_{\alpha}) \hat{L}_{\beta}, \quad (13)$$

где τ_{α} — операторы «изотопического спина», равные

$$\tau_1 = \tau_+ + \tau_-, \quad \tau_2 = -i(\tau_+ - \tau_-), \quad \tau_3 = \tau_+ \tau_- - \tau_- \tau_+, \quad (14)$$

$\mathbf{r}$ — координаты нуклона, $\hat{A}_{\beta}$ — оператор, действующий на $\varphi_{\alpha}(\mathbf{r})$. Предполагается, что существуют сопряженные $\hat{A}_{\alpha}$ операторы $\hat{B}_{\beta}$, удовлетворяющие соотношению:

$$\int f(\mathbf{r}) \hat{A}_{\beta} \chi(\mathbf{r}) d\tau = \int \chi(\mathbf{r}) \hat{B}_{\beta} f(\mathbf{r}) d\tau \quad (15)$$

при произвольных квадратично интегрируемых f и χ . Оператор $\hat{L}_\beta$ действует на Ψ , причем только на пространственные и спиновую координаты нуклона, но не на его степень свободы, связанную с зарядом. Таким образом $\hat{L}_\beta$ коммутирует с τ_0 и τ_α , а будучи применен к разложению (12), оставляет неизменными Q_p и Q_n .

Предполагается, что оператор $\hat{H}'$ — самосопряженный и удовлетворяет требованиям, вытекающим из однородности и изотропности пространства. Общеизвестные формы взаимодействия: скалярное, псевдоскалярное, псевдовекторное и др., являются частными случаями (13) и будут специально рассмотрены в следующих статьях. В случае протяженного источника взаимодействие также можно представить в виде (13), (15).

Пока предположим, что имеется всего один нуклон. Этого достаточно для иллюстрации приближенного метода рассмотрения полевой массы, полевого момента инерции нуклона, его магнитного момента и некоторых других вопросов. В дальнейшем, при вычислении ядерных сил результаты будут обобщены на случай нескольких нуклонов.

3. Приближенный метод

Основной задачей является отыскание собственных функций и собственных значений оператора энергии системы, т. е. необходимо решить уравнение

$$\hat{H}\Psi = H\Psi, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{E}_0 + \hat{H}'. \quad (16)$$

Здесь Ψ является восьмикомпонентной волновой функцией, так как четыре значения принимает дираковский индекс γ и два значения — индекс заряда.

Разобьем колебания мезонного поля на низкочастотные с частотами $\omega_{\pm} \ll \omega'$ ($\hbar\omega'$ -порядка двух-четырех $m_\pi c^2$) и высокочастотные — с частотами $\omega_{\pm} > \omega'$. Развиваемый ниже метод пригоден для рассмотрения взаимодействия частицы только с низкочастотными колебаниями. Поэтому им можно воспользоваться, если принять одно из следующих двух предположений:

1) нуклон протяженный и его радиус не намного меньше $1/\eta$; тогда нуклон взаимодействует главным образом с низкочастотными колебаниями;

2) нуклон точечный; тогда введем сначала взаимодействие с высокочастотными колебаниями мезонного вакуума и таким образом придем к задаче, в которой встречаются все характерные трудности, связанные с точечным источником. Отказавшись от решения этой задачи, но учитывая ее трансляционную симметрию, предположим, что ее решение приводит к некоторой свободной частице с гамильтонианом E_0 типа (10) (или другого типа). После этого введем взаимодействие с низкочастотными колебаниями.

Таким образом при каждом из этих двух предположений остается рассмотреть взаимодействие частицы только с низкочастотными колебаниями. Поэтому ниже под мезонным полем понимается только его низкочастотная часть. Функции $\varphi_\alpha(r)$ предполагаются настолько плавными, что их фурье-разложения содержат главным образом низкочастотные гармоники. Результаты расчета не должны зависеть от частоты ω' , как это и оказывается в дальнейшем.

Предположим, что низкочастотное мезонное поле образовало для нуклона весьма глубокую и узкую потенциальную яму, в которой он локализовался на дискретном энергетическом уровне. Законность этого

предположения будет исследована позже. Предположим далее, что частоты обращения нуклона в этой яме гораздо больше собственных частот колебаний мезонного поля ($\omega_{\alpha} < \omega'$). В этом случае квантовое состояние нуклона будет почти адиабатически следовать за сравнительно медленной деформацией потенциальной ямы, и можно применить адиабатическое приближение квантовой механики.

Математическая формулировка этого приближения заключается в следующем: предполагается, что собственную функцию уравнения (16) можно разбить на два множителя:

$$\Psi = \psi(\mathbf{r}, \dots q_{\alpha\kappa} \dots) \Phi(\dots q_{\alpha\kappa} \dots), \quad \psi(\psi_{1\nu}, \psi_{2\nu}), \quad (17)$$

выбрав их таким образом, чтобы Φ менялась с $q_{\alpha\kappa}$ гораздо быстрее, чем ψ . Это значит, что в выражении

$$\frac{\partial \Psi}{\partial q_{\alpha\kappa}} = \psi \frac{\partial \Phi}{\partial q_{\alpha\kappa}} + \frac{\partial \psi}{\partial q_{\alpha\kappa}} \Phi \quad (18)$$

второй член гораздо меньше первого, и им можно пренебречь. Тогда, применяя оператор (7), (9) к Ψ , получаем

$$\hat{H}_0 \psi \Phi \approx \psi \hat{H}_0 \Phi + \dots \quad (19)$$

Здесь многоточием обозначены малые члены, которые в нулевом приближении отбрасываются, а впоследствии могут быть учтены, как малое возмущение.

Подставляя (17) в (16) и используя приближение (19), получаем два уравнения для ψ и Φ

$$[\hat{E}_0 + \hat{H}'] \psi = E(\dots q_{\alpha\kappa} \dots) \psi, \quad (20)$$

$$[\hat{H}_0 + E(\dots q_{\alpha\kappa} \dots)] \Phi = H \Phi. \quad (21)$$

Первое из них представляет волновое уравнение нуклона при некоторой фиксированной форме мезонного поля; в нем $q_{\alpha\kappa}$ являются параметрами. Второе уравнение представляет собой волновое уравнение колебаний мезонного поля в присутствии нуклона. Принимая во внимание (7), уравнение (21) удобно интерпретировать как уравнение движения системы гармонических осцилляторов в присутствии заданного добавочного поля $E(\dots q_{\alpha\kappa} \dots)$, которое смещает равновесные положения осцилляторов.

Полная потенциальная энергия осцилляторов равна

$$\begin{aligned} V(\dots q_{\alpha\kappa} \dots) &= E(\dots q_{\alpha\kappa} \dots) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{\kappa}, \alpha=1}^3 \hbar \omega_{\vec{\kappa}} q_{\alpha\kappa}^2 \equiv \\ &\equiv E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \int [(\vec{\nabla} \varphi_{\alpha})^2 + \mu^2 \varphi_{\alpha}^2] d\tau. \end{aligned} \quad (22)$$

Вместо уравнения (20) можно воспользоваться вариационным принципом квантовой механики:

$$E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] = \text{extremum}_{\psi} \int \psi^* [\hat{E}_0 + \hat{H}'] \psi d\tau. \quad (23)$$

Здесь экстремизацию следует проводить при фиксированных φ_α , варьируя ψ при дополнительном условии нормировки

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1. \quad (24)$$

Потенциальная энергия осцилляторов может быть переписана в виде

$$V[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] = \text{extremum}_\psi \int \psi^* [\hat{E}_0 + \hat{H}'] \psi d\tau + \\ + 1/2 \sum_{\alpha=1}^3 \int [(\vec{\nabla} \varphi_\alpha)^2 + \mu^2 \varphi_\alpha^2] d\tau. \quad (25)$$

Для определения равновесных положений осцилляторов $q_{\alpha k}^0$ или соответствующей равновесной самосогласованной формы поля необходимо найти минимум величины (25) по $q_{\alpha k}$. Это значит, что для определения равновесных самосогласованных φ_α и ψ необходимо найти экстремум функционала

$$F[\psi \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] = \int \psi^* [\hat{E}_0 + \hat{H}'] \psi d\tau + \\ + 1/2 \sum_{\alpha=1}^3 \int [(\vec{\nabla} \varphi_\alpha)^2 + \mu^2 \varphi_\alpha^2] d\tau, \quad (26)$$

варьируя как ψ , так и φ_α .

Вариация F по φ_α при помощи соотношения (15) может быть записана следующим образом:

$$\delta_{\varphi_\alpha} F = \int [-g_\alpha \sqrt{4\pi} \{\hat{B}, \psi^* \tau_\alpha \hat{L} \psi\} - \Delta \varphi_\alpha + \mu^2 \varphi_\alpha] \delta \varphi_\alpha d\tau, \quad (27)$$

где

$$\{\hat{B}, \psi^* \tau_\alpha \hat{L} \psi\} \equiv \sum_{\beta} \hat{B}_\beta \psi^* \tau_\alpha \hat{L}_\beta \psi. \quad (28)$$

Приравнивая эту вариацию нулю, получаем уравнение, определяющее равновесное φ_α , которое будет отмечаться индексом нуль:

$$\Delta \varphi_\alpha^0 - \mu^2 \varphi_\alpha^0 = -4\pi \eta_\alpha^0, \quad (29)$$

где

$$\eta_\alpha^0(\mathbf{r}) = \frac{g_\alpha}{\sqrt{4\pi}} \{\hat{B}, \psi^* \tau_\alpha \hat{L} \psi\}. \quad (30)$$

Из (29) получается

$$\varphi_\alpha^0(\mathbf{r}) = \int \frac{\eta_\alpha^0(\mathbf{r}') e^{-\mu|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\tau'. \quad (31)$$

Подставляя эти φ_α^0 в функционал (26), получаем новый функционал

$$J[\psi] \equiv F[\psi \varphi_1^0 \varphi_2^0 \varphi_3^0] = \int \psi^* \hat{E}_0 \psi d\tau - 2\pi \sum_{\alpha=1}^3 \int \varphi_\alpha^0 \eta_\alpha^0 d\tau, \quad (32)$$

зависящий уже только от ψ ; этот функционал необходимо теперь экстремизировать, варьируя ψ . $J[\psi]$ будет в дальнейшем играть такую же роль, как аналогичный функционал в теории поляронов.

Для экстремизации функционала $J[\psi]$ его вариация по ψ приравняется нулю, что приводит к следующему уравнению, определяющему ψ^0 :

$$\left[\hat{E}_0 - V 4\pi \sum_{\alpha=1}^3 g_{\alpha} \tau_{\alpha} \{ \hat{A} \varphi_{\alpha}^0, \hat{L} \} \right] \psi^0 = E^0 \psi^0. \quad (33)$$

Здесь под φ_{α}^0 следует понимать величины (31), (30). Таким образом уравнение (33) является нелинейным интегро-дифференциальным уравнением как раз такого типа, какой встречается в самосогласованных задачах. $J[\psi^0]$ и E^0 связаны следующим соотношением:

$$J[\psi^0] = E^0 + 1/2 \sum_{\alpha=1}^3 \int [(\vec{\nabla} \varphi_{\alpha}^0)^2 + \mu^2 \varphi_{\alpha}^{02}] d\tau. \quad (34)$$

Здесь второй член правой части можно интерпретировать как энергию, затрачиваемую на создание статического мезонного поля φ_{α}^0 , а первый член правой части есть изменение энергии нуклона при переходе его из свободного состояния с энергией, равной нулю, на отрицательный дискретный уровень E^0 . Следовательно, $J[\psi^0]$ можно было бы интерпретировать как полную энергию системы, если бы мезонное поле рассматривалось классически. В последнем случае основное состояние системы представляло бы собой статическое мезонное поле φ_{α}^0 , при котором упомянутая выше потенциальная энергия осцилляторов мезонного поля $V(\dots q_{\alpha x} \dots)$ минимальна; состояние нуклона определялось бы уравнением (33) при нижайшем собственном значении энергии нуклона E^0 . Можно показать, что такое самосогласованное состояние устойчиво.

Однако при исследовании большинства интересных явлений мезонное поле должно рассматриваться квантово-механически. В этом случае в основном состоянии системы осцилляторы мезонного поля не будут покоиться, а будут совершать нулевые колебания вблизи своих равновесных положений $q_{\alpha x}^0$. Колебания мезонного поля описываются уравнениями (20) и (21). Точно решить эти уравнения не удастся, однако позже они будут решены приближенно, в предположении, что осцилляторы находятся преимущественно вблизи своих равновесных положений. Иными словами, предполагается, что во время колебаний мезонное поле φ_{α} лишь слегка варьирует вблизи φ_{α}^0 . Критерии случаев, когда это предположение справедливо, будут даны позже.

4. Определение связанной с зарядом части самосогласованной волновой функции нуклона

Самосогласованные уравнения (33), (31) можно точно удовлетворить, если выбрать волновую функцию нуклона в виде произведения

$$\psi^0 = Q \psi_0; \quad (35)$$

здесь ψ_0 — четырехкомпонентная дираковская пространственно-спиновая часть волновой функции, а Q — двухкомпонентная часть, связанная с зарядом

$$Q = c_1 Q_p + c_2 Q_n. \quad (36)$$

Форма (35) является частным случаем общей формы (12). Подстановка (35) в (30), (31) и (33) дает

$$\eta_{\alpha}^0(\mathbf{r}) = g_{\alpha} Q^* \tau_{\alpha} Q \eta^0(\mathbf{r}) \equiv G_{\alpha} \eta^0(\mathbf{r}); \quad \eta^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{V 4\pi} \{ \hat{B}, \psi_0^* \hat{L} \psi_0 \}; \quad (37)$$

$$\varphi_{\alpha}^0 = g_{\alpha} Q^* \tau_{\alpha} Q \varphi^0 \equiv G_{\alpha} \varphi^0; \quad \varphi^0(\mathbf{r}) = \int \frac{\eta^0(\mathbf{r}') e^{-|\mu| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau'; \quad (38)$$

$$[\hat{E}_0 - V 4\pi G^2 \{ \hat{A} \varphi^0, \hat{L} \}] \psi_0 = E^0 \psi_0, \quad (39)$$

где G^2 — собственные значения параметра в нелинейном самосогласованном уравнении

$$\sum_{\alpha=1}^3 g_{\alpha}^2 (Q^* \tau_{\alpha} Q) \tau_{\alpha} Q = G^2 Q. \quad (40)$$

Это уравнение представляет собой условие экстремума функционала

$$\Omega = \sum_{\alpha=1}^3 g_{\alpha}^2 (Q^* \tau_{\alpha} Q)^2 \quad (41)$$

при дополнительном условии нормировки

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (42)$$

Применяя операторы (11) и (14) к функции Q , связанной с зарядом, получаем

$$Q^* \tau_1 Q = c_1^* c_2 + c_2^* c_1; \quad Q^* \tau_2 Q = -i(c_1^* c_2 - c_2^* c_1); \quad (43)$$

$$Q^* \tau_3 Q = |c_1|^2 \mp |c_2|^2.$$

Далее, полагая

$$|c_1|^2 = u; \quad |c_2|^2 = 1 - u \quad (44)$$

и предполагая, что $g_1 = g_2 = g$, получаем

$$\Omega = 4g^2 u (1 - u) + g_3^2 [u \mp (1 - u)]^2. \quad (45)$$

Ниже будут рассмотрены два варианта теории: случай, когда в формуле (14) (в выражении τ_3) и соответственно в формуле (45) берется верхний знак минус (—), и случай, когда берется знак плюс (+).

Случай со знаком минус (—)

Ω имеет экстремум при $u = 1/2$, $G^2 = g^2$. Этот экстремум является максимумом при $g^2 > g_3^2$ и минимумом при $g^2 < g_3^2$. Другой экстремум Ω имеет при $u = 0$ или $u = 1$, $G^2 = g_3^2$. Последний является максимумом при $g^2 < g_3^2$ и минимумом при $g^2 > g_3^2$.

Во всех рассмотренных выше случаях G^2 определяется только одним из коэффициентов g , g_3 и совершенно не зависит от второго. Это значит, как видно из уравнения (39), что вид самосогласованной волновой функции нуклона определяется взаимодействием либо только с заряженными, либо только с нейтральными мезонами.

Особо следует рассмотреть случай $g_3 = g$, известный в литературе под названием «симметричная теория». В этом случае Ω оказывается вовсе не зависящим от u , т. е. стационарным при любом u ($0 \leq u \leq 1$), причем $G^2 = g^2 = g_3^2$. Указанному собственному значению G^2 соответствует бесконечное множество собственных функций Q , которые можно получить, выбирая в (36) всевозможные соотношения между c_1 и c_2 .

Случай со знаком плюс (+)

В этом случае Ω имеет максимум при $u = 1/2$, $G^2 = g^2 + g_3^2$ и минимум при $u = 0$ или $u = 1$, $G^2 = g_3^2$.

Для уравнения (40) не существует других самосогласованных решений, кроме рассмотренных выше. Однако вопрос о существовании для уравнения (33) других самосогласованных решений, не представленных в мультипликативном виде (35), остается открытым.

5. Трансляционное и вращательное вырождение самосогласованных решений

Пусть $\psi^0(\mathbf{r})$, $\varphi_\alpha^0(\mathbf{r})$ есть самосогласованное решение, т. е. экстремаль функционала (32). При разумном выборе вида оператора $\hat{H}'$ функция $[\varphi_\alpha^0(\mathbf{r})]^2$ должна обладать центром симметрии и если не полной сферической симметрией, то по меньшей мере осью симметрии. Выберем декартову систему координат таким образом, чтобы начало ее находилось в центре симметрии поля $[\varphi_\alpha^0(\mathbf{r})]^2$, а ось ox_3 являлась осью симметрии. Поскольку самосогласованное состояние может с равным успехом образоваться в любой точке пространства $\vec{\xi}$, функции $\psi^0(\mathbf{r} - \vec{\xi})$ и $\varphi_\alpha^0(\mathbf{r} - \vec{\xi})$ должны быть тоже экстремальными функционала (32); при любом разумном выборе $\hat{H}'$, отвечающем требованию физической однородности пространства, легко показать, что

$$J[\psi(\mathbf{r} - \vec{\xi})] = J[\psi(\mathbf{r})], \quad (46)$$

откуда следует все сказанное выше.

Таким образом существует бесконечное множество самосогласованных решений вида $\psi^0(\mathbf{r} - \vec{\xi})$, $\varphi_\alpha^0(\mathbf{r} - \vec{\xi})$, где вектор трансляции $\vec{\xi}$ принимает всевозможные постоянные значения. Эти решения условимся кратко называть «транслированными» решениями. Во всех этих самосогласованных состояниях потенциальная энергия осцилляторов мезонного поля имеет одно и то же минимальное значение $J[\psi^0]$. Равновесные положения осцилляторов у решения с аргументом, транслированным на вектор $\vec{\xi}$, равны

$$q_{\alpha\mathbf{x}}^{\vec{\xi}} = q_{\alpha\mathbf{x}}^0 \cos \mathbf{x} \vec{\xi} + q_{\alpha, -\mathbf{x}}^0 \sin \mathbf{x} \vec{\xi}, \quad (47)$$

где $q_{\alpha\mathbf{x}}^0$ — равновесные положения осцилляторов у исходного решения $\psi^0(\mathbf{r})$, центр которого находится в начале координат.

Кроме физической однородности пространства по отношению к трансляциям, следует учесть также изотропность пространства, т. е. физическую однородность по отношению к вращениям. Путем преобразования вращения на произвольные углы исходного решения $\psi^0(\mathbf{r})$, $\varphi_\alpha^0(\mathbf{r})$ можно получить еще одно бесконечное множество решений. Последнее имеет смысл только, если φ_α^0 обладает не сферической, а осевой симметрией.

«Повернутой» волновой функцией будем называть функцию $\psi^\omega(\mathbf{r})$ такого вида, какой имела бы исходная функция $\psi^0(\mathbf{r})$ в повернутой системе координат x'_1, x'_2, x'_3 . Пусть последняя связана с исходной системой координат x_1, x_2, x_3 ортогональным преобразованием

$$x'_\mu = \sum_{\nu=1}^3 a_{\mu\nu} x_\nu \quad (48)$$

или

$$\mathbf{r}' = \|a\| \mathbf{r}; \quad \mathbf{r} = \|a^{-1}\| \mathbf{r}'.$$

Если ввести известную в теории Дирака матрицу S , обладающую свойствами:

$$S^{-1}\alpha_\nu S = \sum_{\lambda=1}^3 a_{\nu\lambda}\alpha_\lambda; \quad S\alpha_4 = \alpha_4 S, \quad (49)$$

то «повернутая» волновая функция определяется следующим образом:

$$\psi^\omega(\mathbf{r}) = S\psi^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r}), \quad \psi^{\omega*}(\mathbf{r}) = \psi^{0*}(\|a^{-1}\| \mathbf{r}) S^{-1}. \quad (50)$$

Используя свойства (49), легко убедиться в том, что

$$\int \psi^{\omega*} \hat{E}_0 \psi^\omega d\tau = \int \psi^{0*} \hat{E}_0 \psi^0 d\tau. \quad (51)$$

Если вид $\hat{H}'$ соответствует требованиям изотропии пространства, то должно быть

$$J[\psi^\omega] = J[\psi^0]. \quad (52)$$

В частности, наиболее распространенное в настоящее время предположение, что η_α^0 и φ_α^0 являются псевдоскалярными, означает

$$\eta_\alpha^\omega(\mathbf{r}) = \eta_\alpha^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r}); \quad \varphi_\alpha^\omega(\mathbf{r}) = \varphi_\alpha^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r}). \quad (53)$$

Из (51) и (53) немедленно следует (52). Формулы (50)–(53) справедливы не только, когда $\psi^0(\mathbf{r})$ есть экстремаль функционала J , но и когда $\psi^0(\mathbf{r})$ — произвольная восьмикомпонентная волновая функция.

Задаваясь всевозможными ортогональными преобразованиями (48) и соответствующими матрицами S , получаем бесконечное множество функций $S\psi^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r})$, которые являются самосогласованными, если таковой является исходная функция $\psi^0(\mathbf{r})$.

Если исходное решение подвергнуть сначала преобразованию поворота, а затем трансляции (или наоборот), то в результате получится тоже самосогласованное решение. Так как операции трансляции и поворота не коммутируют, то условимся сначала производить поворот, а потом трансляцию. Следовательно, под повернутыми и транслированными на вектор $\vec{\xi}$ решениями ниже будут подразумеваться функции

$$S\psi^0(\|a^{-1}\|(\mathbf{r} - \vec{\xi})), \quad \eta_\alpha^0(\|a^{-1}\|(\mathbf{r} - \vec{\xi})), \quad \varphi_\alpha^0(\|a^{-1}\|(\mathbf{r} - \vec{\xi})),$$

а не функции

$$S\psi^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r} - \vec{\xi}), \quad \eta_\alpha^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r} - \vec{\xi}), \quad \varphi_\alpha^0(\|a^{-1}\| \mathbf{r} - \vec{\xi}).$$

6. Приближенный гамильтониан системы

Из коэффициентов c_1 и c_2 , фигурирующих в (36), можно, не нарушая общности, один считать вещественным и положительным. Тогда можно принять

$$c_1 = \cos \frac{\beta}{2}, \quad c_2 = e^{i\gamma} \sin \frac{\beta}{2}, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 \equiv 1, \quad (54)$$

$$0 \leq \beta \leq \pi, \quad 0 \leq \gamma \leq 2\pi.$$

Как видно из раздела 4, при изменении γ $J[\psi^0]$ остается неизменным. При изменении β $J[\psi^0]$ остается постоянным лишь в «симметричной

теории»; во всех же остальных вариантах теории в самосогласованном состоянии β фиксировано в соответствии со значением u .

Полное многообразие самосогласованных решений представляет собой семейство функций с семью параметрами:

$$\psi^0 = \psi^0(\mathbf{r}, \xi_1 \xi_2 \xi_3 \varphi \vartheta \gamma \beta); \quad \eta_\alpha^0 = \eta_\alpha^0(\mathbf{r}, \xi_1 \xi_2 \xi_3 \varphi \vartheta \gamma \beta); \quad \varphi_\alpha^0 = \varphi_\alpha^0(\mathbf{r}, \xi_1 \xi_2 \xi_3 \varphi \vartheta \gamma \beta). \quad (55)$$

Здесь $\xi_1 = v_1$, $\xi_2 = v_2$, $\xi_3 = v_3$ — вектор трансляции аргумента исходного самосогласованного решения, $\varphi = v_4$ и $\vartheta = v_5$ — углы вращения, определяющие ортогональное преобразование (48):

$$\|a\| = \begin{vmatrix} \cos \vartheta \cos \varphi & \sin \varphi & -\sin \vartheta \cos \varphi \\ -\cos \vartheta \sin \varphi & \cos \varphi & \sin \vartheta \sin \varphi \\ \sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{vmatrix}; \quad (56)$$

$$\|a^{-1}\| = \begin{vmatrix} \cos \vartheta \cos \varphi & -\cos \vartheta \sin \varphi & \sin \vartheta \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ -\sin \vartheta \cos \varphi & \sin \vartheta \sin \varphi & \cos \vartheta \end{vmatrix}.$$

$\gamma = v_6$ и $\beta = v_7$ — параметры связанной с зарядом части волновой функции. Если φ_α^0 и η_α^0 обладают сферической симметрией, то параметры $\varphi = v_4$ и $\vartheta = v_5$ отсутствуют. Если нет зарядовой симметрии, то параметр $\beta = v_7$ отсутствует.

Как было показано в разделах 4 и 5,

$$J[\psi^0(\mathbf{r}, v_1 v_2 v_3 \dots)] = J[\psi^0(\mathbf{r}, 000 \dots)]. \quad (57)$$

Дальнейшая задача состоит в приближенном решении уравнений (20) и (21). Приближение основывается на предположении, что осцилляторы мезонного поля колеблются преимущественно вблизи конфигураций, в которых их потенциальная энергия минимальна. Это значит, что $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$ почти всегда близка к одной из функций семейства $\varphi_\alpha^0(\mathbf{r}, \dots v_i \dots)$. Таким образом, полагая

$$\varphi_\alpha(\mathbf{r}) = \varphi_\alpha^0(\mathbf{r}, \dots v_i \dots) + \varphi'_\alpha(\mathbf{r}) \quad (58)$$

и выбирая для каждой данной $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$ надлежащие значения параметров v_i , можно $\varphi'_\alpha(\mathbf{r})$ рассматривать как малое возмущение в той части пространства, где φ_α^0 существенно отлична от нуля.

В нулевом приближении член $\varphi'_\alpha(\mathbf{r})$ опускается, и тогда решением уравнения (20) будет ψ^0 . Далее, вводя член $\varphi'_\alpha(\mathbf{r})$ как малое возмущение и пользуясь обычной теорией возмущений, можно вычислить собственное значение энергии нуклона в первом приближении. Оно оказывается равным

$$E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] = \int \psi^{0*} \hat{E}_0 \psi^0 d\tau - 4\pi \sum_{\alpha=1}^3 \int \eta_\alpha^0 \varphi_\alpha d\tau. \quad (59)$$

Подставляя выражение энергии (59) в оператор, стоящий в левой части (21), получаем

$$\begin{aligned}
 H_0 + E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3] &= J[\psi^0] + 1/2 \sum_{\alpha=1}^3 \int \left[\frac{\pi_{\alpha}^2}{c^2} + (\vec{\nabla} \varphi_{\alpha}')^2 + \mu^2 \varphi_{\alpha}'^2 \right] d\tau = \\
 &= J[\psi^0] + 1/2 \sum_{\vec{x}, \alpha=1}^3 \hbar \omega_{\vec{x}} \left[(q_{\alpha \vec{x}} - q_{\alpha \vec{x}}^0)^2 - \frac{\partial^2}{\partial q_{\alpha \vec{x}}^2} \right]. \quad (60)
 \end{aligned}$$

Здесь $q_{\alpha \vec{x}}^0 (\dots v_i \dots)$ — безразмерные обобщенные координаты поля $\varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}, \dots v_i \dots)$; они определяются аналогично координатам $q_{\alpha \vec{x}}$.

$$\begin{aligned}
 q_{\alpha \vec{x}}^0 &= \varphi_{\alpha \vec{x}}^0 \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\omega_{\vec{x}}}{\hbar}}; \\
 \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}) &= \sum_{\vec{x}} \varphi_{\alpha \vec{x}}^0 \chi_{\vec{x}}(\mathbf{r}). \quad (61)
 \end{aligned}$$

Возникает вопрос о том, как следует выбирать параметры v_i , чтобы функции φ_{α}^0 лучше всего аппроксимировали φ_{α} . Очевидно, значения v_i должны зависеть от поля $\varphi_{\alpha}(\mathbf{r})$, при котором надлежит вычислить энергию $E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3]$. Лучшим выбором v_i следует признать такой, при котором $E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3]$ точнее всего выражается формулой (59). Согласно вариационному принципу (23), наибольшую точность при вычислении $E[\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3]$ обеспечит такой выбор v_i , при котором энергия (59) минимальна. Первый член в (59) не зависит от v_i . Поэтому условия минимума имеют следующий вид:

$$\frac{\partial E}{\partial v_i} = -4\pi \sum_{\alpha=1}^3 \int \frac{\partial \eta_{\alpha}^0}{\partial v_i} \varphi_{\alpha} d\tau = 0. \quad (62)$$

Из этих уравнений определяются v_i . Последние являются функционалами от φ_{α} . Если ввести оператор

$$\hat{\omega} = c \sqrt{\mu^2 - \Delta} \quad (63)$$

и учесть уравнение (29), то уравнения (62) можно переписать в виде

$$\sum_{\alpha=1}^3 \int \frac{\partial \hat{\omega}^2 \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i} \varphi_{\alpha} d\tau = 0. \quad (64)$$

Возможны и другие методы определения параметров v_i . Например, можно аппроксимировать φ_{α} функцией φ_{α}^0 при помощи метода наименьших квадратов и выбрать v_i так, чтобы интеграл

$$\sum_{\alpha=1}^3 \int [\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha}^0]^2 d\tau \quad (65)$$

был минимален. Раскрывая здесь квадрат разности и учитывая, что квадрат первого члена, а после интегрирования также и квадрат второго члена не зависят от v_i , условие минимума можно записать в виде

$$\sum_{\alpha=1}^3 \int \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i} \varphi_{\alpha} d\tau = 0. \quad (66)$$

Этими уравнениями можно пользоваться для определения v_i вместо уравнений (64); получающиеся при этом результаты весьма близки к полученным из уравнений (64), если только φ_α действительно мало отличается от φ_α^0 .

Можно также пользоваться системой уравнений типа промежуточного между (64) и (66):

$$\sum_{\alpha=1}^3 \int \frac{\partial \hat{\omega} \varphi_\alpha^0}{\partial v_i} \varphi_\alpha d\tau = 0. \quad (67)$$

В этом случае дальнейшие вычисления выглядят несколько проще.

Оператор (60) и есть искомый гамильтониан, определяющий движение мезонного поля в присутствии нуклона. Его собственные значения представляют энергию всей системы H , как показывает уравнение (21). Собственные функции этого оператора $\Phi(\dots q_{\alpha\kappa} \dots)$, будучи умножены на $\psi(\mathbf{r})$, представляют собой волновые функции системы [см. формулу (17)].

Оператор энергии (60) существенно отличается от оператора энергии системы независимых гармонических осцилляторов, так как величины v_i , а следовательно, и $q_{\alpha\kappa}^0(\dots v_i \dots)$ являются сложными функциями $q_{\alpha\kappa}$. В явном виде эти функции определить не удастся.

Приближенные собственные функции и собственные значения оператора (60) будут найдены в следующей статье. Сравнение вышеизложенного метода с методом Гейликмана [10] будет дано в одной из последующих статей.

Институт физики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
19 января 1954 г.

Литература

- [1] G. Wentzel. *Helv. Phys. Acta*, 13, 269, 1940; 14, 633, 1941; 16, 551, 1943.—
[2] J. R. Oppenheimer a. J. Schwinger. *Phys. Rev.*, 60, 150, 1941.—
[3] W. Pauli a. S. M. Dancoff. *Phys. Rev.*, 62, 85, 1942.—[4] С. И. Пекар. *ЖЭТФ*, 16, 335, 1946; 16, 341, 1946.—[5] С. И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов*, Гостехтеоретиздат, 1951.—[6] С. И. Пекар. *ЖЭТФ*, 17, 868, 1947.—
[7] Л. Д. Ландау и С. И. Пекар. *ЖЭТФ*, 18, 419, 1948.—[8] С. И. Пекар. *ЖЭТФ*, 19, 796, 1949.—[9] Н. Н. Боголюбов. *Укр. матем. журн.*, 2, 3, 1950.—[10] Б. Т. Гейликман. *ДАН СССР*, 90, 359, 1953; 90, 991, 1953; 91, 39, 1953; 91, 225, 1953.

СВОБОДНО ДВИЖУЩИЙСЯ НУКЛОН

С. И. Пекар

Рассмотрен нуклон, сильно взаимодействующий с полем заряженных и нейтральных мезонов. Найдены приближенная волновая функция и энергия системы. Вычислены мезонно-полевая масса нуклона в разных изобарных состояниях, мезонно-полевой момент инерции нуклона и квазимомент инерции, характеризующий движение по «зарядовым» степеням свободы. Получено взаимодействие между поступательным и вращательным движением нуклона.

1. Введение

В предыдущей статье [1] рассматривался нуклон, сильно взаимодействующий с полем заряженных и нейтральных мезонов. Гамильтониан этой системы был упрощен при помощи ряда приближений. В результате задача определения стационарных квантовых состояний системы свелась к отысканию собственных функций и собственных значений оператора энергии

$$\hat{H} = J[\psi^0] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{\alpha}, \alpha=1}^3 \hbar \omega_{\vec{\alpha}} \left[(q_{\vec{\alpha}\alpha} - q_{\vec{\alpha}\alpha}^0 (\dots v_i \dots))^2 - \frac{\partial^2}{\partial q_{\vec{\alpha}\alpha}^2} \right]. \quad (1)$$

Здесь сохранены все обозначения статьи [1].

Параметры семейства самосогласованных решений будем попрежнему обозначать v_i . Среди них первые три:

$$v_1 = \xi_1, \quad v_2 = \xi_2, \quad v_3 = \xi_3 \quad (2)$$

определяют трансляцию аргумента исходного решения на произвольный вектор $\vec{\xi}$;

$$v_4 = \varphi, \quad v_5 = \vartheta \quad (3)$$

— углы, характеризующие преобразования вращения исходного решения и определяющие направление оси симметрии «повернутого» решения. Параметры φ и ϑ отсутствуют, если φ_{α}^0 обладает сферической симметрией [1]. Параметры

$$v_6 = \gamma, \quad v_7 = \beta \quad (4)$$

— параметры преобразования вращения самосогласованного решения в пространстве изотопического спина.

Из трех методов определения v_i , предложенных в конце [1], предпочтительнее тот, при котором дальнейшие вычисления выглядят несколько проще: v_i определим как корни системы уравнений

$$\sum_{\vec{\alpha}\alpha} \frac{\partial q_{\vec{\alpha}\alpha}^0 (\dots v_i \dots)}{\partial v_i} q_{\vec{\alpha}\alpha} = 0 \quad \text{или} \quad \sum_{\alpha=1}^3 \int \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i} \hat{\omega} \varphi_{\alpha} d\tau = 0, \quad (5)$$

где

$$\hat{\omega} = c \sqrt{\mu^2 - \Delta}. \quad (6)$$

Напомним, что

$$q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} = \varphi_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\omega_{\kappa}^{\rightarrow}}{\hbar}}; \quad q_{\alpha\kappa}^0(\cdots v_i \cdots) = \varphi_{\alpha\kappa}^0(\cdots v_i \cdots) \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\omega_{\kappa}^{\rightarrow}}{\hbar}}. \quad (7)$$

Задача этой статьи заключается в отыскании приближенных собственных функций и собственных значений оператора (1). Это удастся сделать без конкретизации функций η_{α}^0 , φ_{α}^0 и $q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$, т. е. без конкретизации оператора взаимодействия нуклона с мезонным полем.

2. Некоторые свойства функций $v_i(\cdots q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \cdots)$ и соотношения, необходимые в дальнейшем

В неявном виде $v_i(\cdots q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \cdots)$ определяются из уравнений (5), в явном же виде их не удастся определить. Однако поставленную задачу, оказывается, удастся решить и не зная явного выражения $v_i(\cdots q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \cdots)$. Необходимо лишь установить ряд свойств этих функций.

Очевидно, что при одновременном умножении всех $q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$ на произвольный множитель t корни уравнений (5) v_i остаются неизменными. Следовательно,

$$v_i(\cdots t q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \cdots) \equiv v_i(\cdots q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \cdots), \quad (8)$$

т. е. v_i являются однородными функциями $q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$, причем порядок однородности равен нулю. Отсюда следует

$$\sum_{\alpha\kappa} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \equiv 0. \quad (9)$$

Для определенности условимся под выражением

$$\varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}) = \varphi_{\alpha}^0(x, y, z) \quad (10)$$

понимать исходное самосогласованное решение, т. е. такое решение, центр симметрии которого расположен в начале координат, а ось симметрии совпадает с осью oz (если нет полной сферической симметрии). Повернутое транслированное решение будем выражать при помощи той же функции φ_{α}^0 , но от других более сложных аргументов x_1, y_1, z_1 ; оно будет записываться в виде

$$\varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}_1) = \varphi_{\alpha}^0(x_1, y_1, z_1), \quad (11)$$

где

$$\mathbf{r}_1 = \|a^{-1}\|(\mathbf{r} - \vec{\xi}). \quad (12)$$

Учитывая, что оператор $\hat{\omega}$ инвариантен по отношению к вращению и трансляции, можно путем замены переменных под интегралом показать, что величина:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \int [\hat{\omega}^{n_1} \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}_1)] [\hat{\omega}^{n_2} \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}_1)] d\tau &= \sum_{\alpha} \int \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}_1) \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}_1) d\tau = \\ &= \sum_{\alpha} \int \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}) \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(\mathbf{r}) d\tau, \quad n = n_1 + n_2, \end{aligned} \quad (13)$$

не зависит от v_i . Полагая в (13) $n_1 = n_2 = n/2$ и дифференцируя по v_i и по v_j , получаем

$$\sum_{\alpha} \int \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0(r_1)}{\partial v_i} \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(r_1) d\tau = 0; \quad (14)$$

$$\sum_{\alpha} \int \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i} \frac{\partial \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_j} d\tau = - \sum_{\alpha} \int \frac{\partial^2 \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i \partial v_j} \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0 d\tau. \quad (15)$$

В дальнейшем неоднократно встретятся величины

$$R_{ij}^{(n)} = \sum_{\alpha} \int \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_i} \frac{\partial \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0}{\partial v_j} d\tau, \quad (16)$$

к вычислению которых мы и перейдем.

При вычислении R_{ij} с $i, j \leq 3$, следует иметь в виду, что

$$-\frac{\partial \varphi_{\alpha}^0(r_1)}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial x_1} a_{1i}^{-1} + \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial y_1} a_{2i}^{-1} + \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial z_1} a_{3i}^{-1}. \quad (17)$$

В результате, если учесть осевую симметрию φ_{α}^0 и зеркальную симметрию $[\varphi_{\alpha}^0]^2$ по отношению к плоскости xu , то для $i, j \leq 3$ получается

$$R_{ij}^{(n)} = O^{(n)} \delta_{ij} + P^{(n)} a_{3i}^{-1} a_{3j}^{-1}; \quad O^{(n)} = - \int \frac{\partial^2 \varphi_{\alpha}^0(r)}{\partial x^2} \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(r) d\tau; \\ O^{(n)} + P^{(n)} = - \int \frac{\partial^2 \varphi_{\alpha}^0(r)}{\partial z^2} \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(r) d\tau. \quad (18)$$

a_{hi}^{-1} определяются формулой (56) статьи [1]:

$$R_{11}^{(n)} = O^{(n)} + P^{(n)} \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi; \quad R_{12}^{(n)} = R_{21}^{(n)} = -P^{(n)} \sin^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi; \\ R_{22}^{(n)} = O^{(n)} + P^{(n)} \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi; \quad R_{13}^{(n)} = R_{31}^{(n)} = -P^{(n)} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi; \\ R_{33}^{(n)} = O^{(n)} + P^{(n)} \cos^2 \vartheta; \quad R_{23}^{(n)} = R_{32}^{(n)} = P^{(n)} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi. \quad (19)$$

Если φ_{α}^0 сферически симметричны, то $P^{(n)} = 0$.

Далее, в случае осевой симметрии φ_{α}^0 легко получить

$$\frac{\partial \varphi_{\alpha}^0(r_1)}{\partial \varphi} = \sin \vartheta \left[y_1 \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial z_1} - z_1 \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial y_1} \right]; \quad (20)$$

$$\frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial \vartheta} = z_1 \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial \varphi_{\alpha}^0}{\partial z_1}. \quad (21)$$

При помощи формул (17), (20) и (21) получается

$$R_{4i}^{(n)} = \delta_{4i} R_4^{(n)}; \quad R_{5i}^{(n)} = \delta_{5i} R_5^{(n)}; \quad (22)$$

$$R_5^{(n)} = - \sum_{\alpha} \int \frac{\partial^2 \varphi_{\alpha}^0(r)}{\partial \Omega^2} \hat{\omega}^n \varphi_{\alpha}^0(r) d\tau; \quad R_4^{(n)} = R_5^{(n)} \sin^2 \vartheta. \quad (23)$$

Здесь Ω — угол вращения вектора r вокруг какой-нибудь оси, перпендикулярной oz . Например,

$$\Omega = \arctg \frac{z}{y}; \quad \frac{\partial}{\partial \Omega} = y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}. \quad (24)$$

Переходя к вычислению $R_{6i}^{(n)}$ и $R_{7i}^{(n)}$, необходимо воспользоваться формулами (54), (43), (37) и (38) статьи [1]. Из них получается

$$G_1 = g \sin \beta \cos \gamma; \quad G_2 = g \sin \beta \sin \gamma; \quad G_3 = g_3 \cos \beta. \quad (25)$$

Затем, по формулам (16) и (14) получается

$$R_{6i}^{(n)} = \delta_{6i} R_6^{(n)}; \quad R_{7i}^{(n)} = \delta_{7i} R_7^{(n)}; \quad (26)$$

$$R_7^{(n)} = g^2 \int \varphi^0 \hat{\omega}^n \varphi^0 d\tau; \quad R_6^{(n)} = R_7^{(n)} \sin^2 \beta. \quad (27)$$

Величины $O^{(n)}$, $P^{(n)}$, $R_6^{(n)}$ и $R_7^{(n)}$ уже не зависят от v_i .

Производные $\partial v_i / \partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$ можно вычислить путем дифференцирования уравнений (5). Придавая $q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$ произвольные изменения, т. е. производя произвольную вариацию $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$, можно вычислить соответствующие изменения dv_j параметров v_j . Они, согласно (5), определяются из системы уравнений

$$-\sum_j dv_j \sum_\alpha \int \frac{\partial^2 \varphi_\alpha^0}{\partial v_i \partial v_j} \hat{\omega} \varphi_\alpha d\tau = \sum_\alpha \int \frac{\partial \varphi_\alpha^0}{\partial v_i} \hat{\omega} \delta \varphi_\alpha d\tau = c^2 \hbar \sum_{\alpha\kappa}^{\rightarrow} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial v_i} dq_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}. \quad (28)$$

Поскольку основное предположение заключается в том, что φ_α мало отличается от φ_α^0 , можно приближенно в (28) φ_α заменить на φ_α^0 , после чего (28) переписывается в виде

$$\sum_j R_{ij}^1 \frac{\partial v_j}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} = c^2 \hbar \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial v_i}. \quad (29)$$

Отсюда немедленно получается для $i = 4, 5, 6, 7$

$$\frac{\partial v_i}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} = \frac{c^2 \hbar}{R_i^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial v_i}. \quad (30)$$

Для определения $\partial \xi_i / \partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}$ приходится решить систему трех линейных уравнений ($i = 1, 2, 3$).

Если вместо ξ_i ввести три новых переменных ζ_i по формуле

$$\vec{\zeta} = \| a^{-1} \| \vec{\xi}; \quad \frac{\partial}{\partial \xi_i} = \sum_{j=1}^3 a_{ji}^{-1} \frac{\partial}{\partial \zeta_j}, \quad (31)$$

то система трех упомянутых выше уравнений существенно упрощается и приобретает вид

$$\frac{\partial \zeta_j}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} = \frac{c^2 \hbar}{O^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial \zeta_j} \text{ при } j = 1, 2; \quad \frac{\partial \zeta_3}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} = \frac{c^2 \hbar}{O^1 + P^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial \zeta_3}. \quad (32)$$

Отсюда

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial q_{\alpha\kappa}^{\rightarrow}} = c^2 \hbar \left[\frac{a_{11}}{O^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial \zeta_1} + \frac{a_{12}}{O^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial \zeta_2} + \frac{a_{13}}{O^1 + P^1} \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial \zeta_3} \right]. \quad (33)$$

Пользуясь этими формулами, легко вычислить ряд других величин, необходимых в дальнейшем. Так

$$\sum_{\vec{\alpha}\kappa} \sum_{i,j=1}^3 \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial \xi_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial \xi_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} = \sum_{\vec{\alpha}\kappa} \sum_{i,j=1}^3 \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial \zeta_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial \zeta_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i \partial \zeta_j} =$$

$$= A \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} \right) + \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j}, \quad (34)$$

где

$$A = \frac{c^2 \hbar^2 O^{(2)}}{(O^1)^2}; \quad A_{ij} = c^2 \hbar^2 \left[\frac{O^{(2)} + P^{(2)}}{(O^1 + P^1)^2} - \frac{O^{(2)}}{(O^1)^2} \right] a_{i3} a_{j3}. \quad (35)$$

При помощи формул (16) и (20)–(27) можно показать, что при $i > 3$,

$$\sum_{\vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial v_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} = \delta_{ij} A_i, \quad \text{где } A_i = c^2 \hbar^2 \frac{R_i^{(2)}}{(R_i^1)^2}, \quad (36)$$

$$A_4 = \frac{A_5}{\sin^2 \vartheta}; \quad A_6 = \frac{A_7}{\sin^2 \beta}, \quad (37)$$

причем A_5 и A_7 не зависят от v_j .

Несколько более длинное, но столь же элементарное вычисление дает

$$\sum_{\vec{\alpha}\kappa} \sum_{i,j=1}^7 \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial v_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \left(\frac{\partial}{\partial v_j} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \right) \frac{\partial}{\partial v_i} = A_5 \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + A_7 \operatorname{ctg} \beta \frac{\partial}{\partial \beta}. \quad (38)$$

Если φ_{α}^0 обладают сферической симметрией, то следует положить

$$P^{(n)} = R_4^{(n)} = R_5^{(n)} = A_{ij} = A_4 = A_5 = 0.$$

3. Энергетический спектр и волновые функции свободно движущегося нуклона

В этом разделе будут найдены приближенные собственные значения и собственные функции оператора (1). Последние будем искать в виде

$$\Phi(\dots q_{\vec{\alpha}\kappa} \dots) = V(\dots v_i \dots) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\vec{\alpha}\kappa} (q_{\vec{\alpha}\kappa} - q_{\vec{\alpha}\kappa}^0)^2 \right\} \prod_{l=1}^N q_l. \quad (39)$$

Здесь q_l — некоторые из координат $q_{\vec{\alpha}\kappa}$.

Аргументы $q_{\vec{\alpha}\kappa}$ входят в Φ непосредственно, а, кроме того, содержатся в $v_i(\dots q_{\vec{\alpha}\kappa} \dots)$. Пусть $\partial / \partial^* q_{\vec{\alpha}\kappa}$ означает дифференцирование только по $q_{\vec{\alpha}\kappa}$, не входящим в аргументы v_i . Тогда

$$\frac{\partial}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} = \frac{\partial}{\partial^* q_{\vec{\alpha}\kappa}} + \sum_{i=1}^7 \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial}{\partial v_i}, \quad (40)$$

$$\sum_{\vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial^2}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}^2} = \sum_{\vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial^2}{\partial^* q_{\vec{\alpha}\kappa}^2} + \sum_{\vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial v_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} +$$

$$+ \sum_{\vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial v_j}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \left(\frac{\partial}{\partial v_j} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \right) \frac{\partial}{\partial v_i} + 2 \sum_{i \neq \vec{\alpha}\kappa} \hbar\omega_{\vec{\alpha}} \frac{\partial v_i}{\partial q_{\vec{\alpha}\kappa}} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial^* q_{\vec{\alpha}\kappa}}, \quad (41)$$

Учитывая, что v_l удовлетворяют уравнениям (5), получаем

$$\frac{\partial \Phi}{\partial v_l} = \frac{\partial V}{\partial v_l} e^{-s} \prod_{l=1}^N q_l, \quad (42)$$

где

$$s = 1/2 \sum_{\alpha\kappa} (q_{\alpha\kappa} - q_{\alpha\kappa}^0)^2; \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial v_i \partial v_j} = \frac{\partial^2 V}{\partial v_i \partial v_j} e^{-s} \prod_{l=1}^N q_l - \frac{1}{c^2 \hbar} R_{ij}^1 \Phi + \sum_{\alpha\kappa} (q_{\alpha\kappa} - q_{\alpha\kappa}^0) \frac{\partial^2 q_{\alpha\kappa}^0}{\partial v_i \partial v_j} \Phi; \quad (44)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial v_l \partial^* q_{\alpha\kappa}} = -\frac{\partial V}{\partial v_l} (q_{\alpha\kappa} - q_{\alpha\kappa}^0) e^{-s} \prod_{l=1}^N q_l + \frac{\partial q_{\alpha\kappa}^0}{\partial v_l} \Phi + \frac{\partial V}{\partial v_l} e^{-s} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\kappa}} \prod_{l=1}^N q_l. \quad (45)$$

Принимая во внимание формулы (34)–(38) и (41)–(45), результат действия оператора (1) на Φ можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Phi = & \left\{ J[\psi^0] + \frac{3}{2} \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} + \sum_{l=1}^N \hbar \omega_l - \hbar \frac{O^{(2)}}{O^1} - \frac{\hbar}{2} \frac{O^{(2)} + P^{(2)}}{O^1 + P^1} - \right. \\ & \left. - \hbar \frac{R_5^{(2)}}{R_5^1} - \hbar \frac{R_7^{(2)}}{R_7^1} \right\} \Phi + e^{-s} \prod_{l=1}^N q_l \hat{\mathcal{H}} V + \hat{H}_1 \Phi, \end{aligned} \quad (46)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & -\frac{1}{2} \left\{ A \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} \right) + \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} + \right. \\ & \left. + A_5 \left[\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + A_7 \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \operatorname{ctg} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] \right\}, \quad (47) \\ \hat{H}_1 \Phi = & - \sum_{\alpha\kappa} \hbar \omega_{\alpha} \frac{\partial v_l}{\partial q_{\alpha\kappa}} \frac{\partial V}{\partial v_l} e^{-s} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\kappa}} \prod_{l=1}^N q_l. \end{aligned}$$

При получении этого результата снова было использовано предположение, что φ_{α} мало отличается от φ_{α}^0 ; поэтому, если подинтегральная функция содержит множитель φ_{α} и значительна только в локальной области, где существенно отлична от нуля φ_{α}^0 , можно под интегралом заменить φ_{α} на φ_{α}^0 . Подобное приближение уже делалось при выводе формул (29). На основании этих соображений был отброшен последний член в формуле (44), а также член, возникший в $\hat{H}\Phi$ из первого члена правой части (45). Впоследствии эти отброшенные члены можно ввести как малые возмущения и таким образом получить следующие приближения.

Функция $V(\dots v_l \dots)$ выбирается так, чтобы она удовлетворяла уравнению

$$\hat{\mathcal{H}} V = \mathcal{H} V \quad (48)$$

($\mathcal{H}$ — постоянная).

Тогда из (46) получается

$$\hat{H}\Phi = \left[J[\psi^0] + \frac{3}{2} \sum_{\vec{x}} \hbar \omega_{\vec{x}} + \sum_{l=1}^N \hbar \omega_l - \hbar \frac{O^{(2)}}{O^1} - \frac{\hbar}{2} \frac{O^{(2)} + P^{(2)}}{O^1 + P^1} - \right. \\ \left. - \hbar \frac{R_5^{(2)}}{R_5^1} - \hbar \frac{R_7^{(2)}}{R_7^1} + \mathcal{H} \right] \Phi + \hat{H}_1 \Phi. \quad (49)$$

Волновая функция (39) соответствует такому состоянию системы, в котором все осцилляторы мезонного поля находятся в основном состоянии, за исключением N осцилляторов, которые находятся в состояниях, одноквантово возбужденных. В формуле (49) член $\frac{3}{2} \sum_{\vec{x}} \hbar \omega_{\vec{x}}$ представляет энергию нулевых колебаний всех осциллято-

ров, а член $\sum_{l=1}^N \hbar \omega_l$ — энергию одноквантового возбуждения N осцилляторов. Физически это означает, что помимо нуклона имеется еще N свободных мезонов. В случае отсутствия свободных мезонов, когда $N=0$, $\hat{H}_1 \Phi \equiv 0$; это значит, как видно из формулы (49), что Φ является собственной функцией оператора $\hat{H}$ [все члены квадратной скобки в (49) постоянны]. Соответствующее собственное значение энергии системы равно

$$H = J[\psi^0] + \frac{3}{2} \sum_{\vec{x}} \hbar \omega_{\vec{x}} + \sum_{l=1}^N \hbar \omega_l - \hbar \frac{O^{(2)}}{O^1} - \frac{\hbar}{2} \frac{O^{(2)} + P^{(2)}}{O^1 + P^1} - \hbar \frac{R_5^{(2)}}{R_5^1} - \hbar \frac{R_7^{(2)}}{R_7^1} + \mathcal{H}. \quad (50)$$

В присутствии свободных мезонов Φ не является стационарным состоянием: член $\hat{H}_1 \Phi$ обуславливает рассеяние мезонов на нуклоне. Это рассеяние будет рассмотрено в следующей статье; здесь же мы ограничимся случаем отсутствия свободных мезонов ($N=0$).

В уравнении (48) переменные разделяются: полагая

$$V = e^{ik\vec{x}} F(\varphi, \vartheta) T(\gamma, \beta), \quad (51)$$

получаем для F уравнение

$$\left\{ -\frac{1}{2} A_5 \left[\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{1}{2} A k^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} k_i k_j \right\} F = W_1 F. \quad (52)$$

и для T уравнение

$$-\frac{1}{2} A_7 \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \operatorname{ctg} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] T = W_2 T, \quad (53)$$

причем

$$\mathcal{H} = W_1 + W_2. \quad (54)$$

Полученные выше уравнения относятся к случаю симметричной теории, когда $g_3 = g$. Если же $g_3 \neq g$, то, как указывалось в [1], β имеет фиксированное значение в соответствии с экстремальным значением u . В тех случаях, когда

$$u = \cos^2 \frac{\beta}{2} = \frac{1}{2}, \quad (55)$$

β не является переменным параметром семейства самосогласованных решений, индексы i и j пробегает значения от 1 до 6 (а не до 7) и в уравнениях (47), (48) и (53) отсутствуют члены с производными по β . В этих случаях в формулах (49) и (50) вместо члена $\hbar R_7^{(2)}/R_7^1$ стоит $(\hbar/2)(R_7^{(2)}/R_7^1)$. Из (53), поскольку $\sin \beta = 1$, получается

$$T = e^{im'\gamma}, \quad W_2 = \frac{1}{2} A_7 m'^2, \quad m' = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (56)$$

В тех же случаях, когда

$$u = \cos^2 \frac{\beta}{2} = 0 \quad \text{или} \quad u = \cos^2 \frac{\beta}{2} = 1, \quad \sin \beta = 0, \quad (57)$$

согласно формуле (27) $R_6^{(n)} = 0$, а согласно формуле (25), $G_1 = G_2 = 0$, $G_3 = g_3$. Таким образом самосогласованное решение φ_α^0 оказывается независимым от γ . В этом случае ни β , ни γ не являются параметрами семейства самосогласованных решений и не входят в функцию $V(\dots v_i \dots)$. Индексы i и j пробегает значения от 1 до 5, а в формулах (47), (48) не содержатся производные по β и γ . В формулах (49) и (50) следует совсем опустить член $\hbar R_7^{(2)}/R_7^1$.

В симметричной теории, в которой $g_3 = g$, как β , так и γ являются параметрами семейства самосогласованных решений. В этом случае из уравнения (53) получается

$$T = e^{im'\gamma} P_{l'}^{m'}(\cos \beta); \quad W_2 = \frac{1}{2} A_7 l'(l' + 1), \quad l' = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (58)$$

Здесь $P_{l'}^{m'}$ — присоединенный полином Лежандра.

Уравнение (53), а также формулы (56) и (58) показывают, что движение по степеням свободы γ и β , связанным с зарядом, можно изоморфно отобразить движением некоторого ротатора, у которого момент инерции равен

$$I' = \hbar^2 / A_7. \quad (59)$$

В симметричной теории этот ротатор оказывается сферическим, а в случае (55) получается плоский ротатор. Следует, однако, иметь в виду, что здесь никакого вращения в действительности не происходит, и γ и β вовсе не являются углами в трехмерном пространстве. Поскольку движение по степеням свободы γ и β сопровождается изменением мезонного поля, а последнее обладает значительной инертностью, ясно, что при таком движении переменное мезонное поле должно обладать кинетической энергией. Эта кинетическая энергия равна W_2 .

Переходя к решению уравнения (52), отметим, что здесь мы имеем дело с действительным ротатором, так как φ и ϑ — углы, определяющие направление оси симметрии самосогласованного поля нуклона φ_α^0 в трехмерном пространстве. Поскольку такое вращение сопряжено с изменением мезонного поля, оно характеризуется мезонно-полевым моментом инерции, равным, как видно из (52),

$$I = \hbar^2 / A_5. \quad (60)$$

Зависимость A_{ij} от φ и ϑ можно интерпретировать как зависимость мезонно-полевой массы нуклона от угла между направлением его поступательного движения и осью симметрии поля φ_α^0 . Это приводит к некоторому «взаимодействию» между поступательным и вращательным движениями нуклона. Если упомянутый угол между k и oz_1 обозна-

чить δ , то последний член левой части уравнения (52) можно записать в виде

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} k_i k_j = \frac{1}{2} B k^2 \cos^2 \delta; \quad B = c^2 \hbar^2 \left[\frac{O^{(2)} + P^{(2)}}{(O^1 + P^1)^2} - \frac{O^{(2)}}{(O^1)^2} \right]. \quad (61)$$

Как будет показано в следующей работе, использованные выше приближения законны лишь при не слишком больших скоростях поступательного движения нуклона. В соответствии с этим предположим, что k достаточно мал и член (61) можно рассматривать в уравнении (52) как малое возмущение. Тогда в нулевом приближении

$$F(\varphi, \vartheta) = e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \vartheta), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (62)$$

$$W_1 = \frac{1}{2} A_5 l(l+1) + \frac{1}{2} A k^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Полученные выше ротационно-изобарные состояния отличаются от изобарных состояний Паули и Данкова тем, что у нас l' и l — целочисленны; моменты инерции I' и I также имеют другие значения. Поскольку энергия возбуждения ротационного движения нуклона велика, естественно предположить, что нормальный нуклон находится в состоянии, в котором $m = 0$, $l = 0$. Для этого состояния в первом приближении

$$W_1 = \frac{1}{2} (A + \frac{1}{3} B) k^2. \quad (63)$$

Эта величина представляет собой мезонно-полевою часть кинетической энергии поступательного движения нуклона. Следовательно, при $l=0$, $m=0$ мезонно-полевая масса нуклона равна

$$M_0^0 = \hbar^2 / (A + \frac{1}{3} B). \quad (64)$$

Нетрудно вычислить W_1 и в том случае, когда возбуждено ротационное движение нуклона. Например, при $l=1$ в первом приближении получается для $m=0$

$$W_1 = A_5 + \frac{1}{2} (A + \frac{3}{5} B) k^2. \quad (65)$$

Соответствующая полевая масса нуклона

$$M_1^0 = \hbar^2 / (A + \frac{3}{5} B); \quad (66)$$

для $m = \pm 1$

$$W_1 = A_5 + \frac{1}{2} (A + \frac{1}{5} B) k^2, \quad (67)$$

и соответствующая полевая масса нуклона

$$M_1^{\pm 1} = \hbar^2 / (A + \frac{1}{5} B). \quad (68)$$

Таким образом «взаимодействие» между поступательным и вращательным движениями нуклона приводит к тому, что его полевая масса зависит от квантовых чисел ротационного движения l и m .

Для конкретного вычисления момента инерции нуклона I , квази-момента инерции I' и полевых масс M_l^m необходимо задаться определенным оператором взаимодействия нуклона с мезонным полем $\hat{H}'$ и затем определить φ_α^0 методом, указанным в [1].

Из формул (64), (66) и (68) видно, что независимо от знака B значение M_0^0 лежит между M_1^0 и $M_1^{\pm 1}$. Поскольку A , A_5 и B пропорциональны $\hbar^2$, величины I' , I и M_l^m не зависят от $\hbar$. Поэтому при предельном переходе от квантовой к классической мезодинамике ($\hbar \rightarrow 0$) эти величины не меняются.

Полная волновая функция системы дается произведением функции (39), в которую следует подставить найденные выше выражения для V , F и T , на функцию $\psi(\mathbf{r} \cdots q_{\alpha\kappa} \cdots)$, определенную в [1] [см. формулы (17) и (50)]:

$$\Psi = S\psi^0(\mathbf{r}_1) \exp \left\{ i [\mathbf{k}\vec{\xi} + m\varphi] - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\kappa} (q_{\alpha\kappa} - q_{\alpha\kappa}^0)^2 \right\} P_l^m(\cos \vartheta) T_{l'}^{m'}(\gamma\beta). \quad (69)$$

Полная энергия системы дается формулой (50), в которую следует подставить $\mathcal{H}$ в виде $W_1 + W_2$; при этом следует учесть замечания, сделанные после формул (55), (56) и (57).

Критерии применимости сделанных выше приближений, а также численные расчеты с конкретным видом оператора взаимодействия нуклона с мезонным полем $\hat{H}'$ будут опубликованы в последующих статьях.

Институт физики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
19 января 1954 г.

Литература

[1] С. И. Пекар. ЖЭТФ, этот выпуск, стр. 398.

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВЕЯЩЕГОСЯ ЭЛЕКТРОНА. II

Н. Ф. Нелина

При помощи результатов, полученных в работе [1], найдено значение величины квантовой поправки к полной интенсивности излучения светящегося электрона.

В нашей предыдущей работе [1] (в дальнейшем цитируется как I) было показано, что квантовые поправки к интенсивности излучения гармоники $\nu_{\text{макс}}$ светящегося электрона в области релятивистских энергий по порядку величины равны $\nu_{\text{макс}}/n$ (где $\nu_{\text{макс}}$ — номер гармоники, на которую приходится максимум классического излучения, n — энергетическое квантовое число)¹. В настоящей статье мы, исходя из выражений, полученных в работе [1], найдем значение величины квантовой поправки к интенсивности излучения светящегося электрона.

1. Расположим единичный вектор $\mathbf{k}_0$, характеризующий направление движения фотона, в плоскости zy , и пусть ϑ — угол, который образует с осью z вектор $\mathbf{k}_0$. Тогда [см. I и [3], формулы (5) — (9)] интенсивность излучения ν -й гармоники в элемент телесного угла $d\Omega$ с учетом отдачи излучающего электрона [$A_z \neq 0$]:

$$dI_\nu = \frac{c}{2\pi} k^2 [(A_x)_{mm'}^2 + (A_y)_{mm'}^2 \cos^2 \vartheta + (A_z)_{mm'}^2 \sin^2 \vartheta - 2(A_z)_{mm'}(A_y)_{mm'} \sin \vartheta \cos \vartheta] R_0^2 d\Omega, \quad (1)$$

где $k = \omega_{mm'}/c$; $A_{mm'} = \frac{1}{cR_0} \int eS_{mm'} e^{-i(kr)} d\tau$; $eS_{mm'}$ — квантовая плотность тока; R_0 — радиус-вектор точки наблюдения.

При помощи волновых функций, найденных в предположении, что излучающая частица описывается уравнением Клейна — Фока [см. I и [3], формулы (1), (2)], выражение для полной интенсивности излучения, если иметь в виду (1) и заменить суммирование по ν интегрированием, запишется так:

$$I = \frac{e^2 \omega_0^2 \beta^2}{4c} \int_0^\infty \nu^2 d\nu \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \left[1 + \frac{\nu}{2n} + O\left(\frac{\nu^2}{n^2}\right) \right] \left[(2AI'_{mm'})^2 + (2BI'_{mm'})^2 \cos^2 \vartheta + \frac{x_1}{n} (AI'_{mm'})^2 \sin^2 \vartheta + \sqrt{\frac{x_1}{n}} I_{mm'}^2 \sin \vartheta \cos \vartheta \right], \quad (2)$$

где

$$A = \frac{\nu}{2n} \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) + O\left(\frac{\nu^3}{n^3}\right); \quad B = 1 + O\left(\frac{\nu^2}{n^2}\right); \quad I_{mm'} = i^{m'-m} \frac{1}{V^{m! m'!}} f_{m'}^\nu(x_1);$$

$$f_{m'}^\nu(x_1) = x_1^{\nu/2} e^{-x_1/2} Q_{m'}^\nu(x_1),$$

$Q_{m'}^\nu(x_1)$ — обобщенный полином Сонина — Лагерра,

$$x_1 = \frac{m}{\beta^2 \sin^2 \vartheta} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\nu}{m} \beta^2 \sin^2 \vartheta} \right)^2, \quad m = n\beta^2.$$

¹ Неточности в нормировочных коэффициентах работы [1], частично отмеченные в [2], исправлены нами в статье [3], в которой обсуждены также другие работы, посвященные квантовой теории светящегося электрона.

Для вычисления последнего выражения воспользуемся найденным нами в предыдущей работе асимптотическим значением ($v \gg 1$, $m' \gg 1$, но $v/m' \ll 1$) для $I_{mm'}$ [см. 1 и 3], формулы (9), (18) и (19)]:

$$I_{mm'}(x_1) = \frac{1}{\pi V x} \sqrt{\frac{z_1}{-z_1}} K_{1/2}(z_1), \quad (3)$$

где

$$z_1(x) = -v \left\{ \frac{1}{2} K - \frac{1}{4} \ln \frac{1 - \delta + 2K}{1 - \delta - 2K} + \frac{M}{8v} \ln \frac{1 - \delta_1 + 2 \frac{v}{M} K}{1 - \delta_1 - 2 \frac{v}{M} K} \right\},$$

$$K = \sqrt{1 - \frac{x^2}{v^2} + \frac{x^4}{v^2 M^2}}, \quad M = 2(m + m') = 4n\beta^2 \left(1 - \frac{v}{2n\beta^2}\right), \quad (4)$$

$$\delta = \frac{x^2}{v^2} - 1, \quad \delta_1 = 2 \frac{x^2}{M^2}, \quad x = \frac{2n\beta}{\sin \vartheta} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta}\right) \sqrt{1 - \frac{v}{2n\beta^2}}.$$

Выражение (3) одинаково хорошо пригодно во всем интервале $0 \leq x \leq v$. Так как нас интересует случай $x \sim v$, $v \ll M$, $\vartheta \sim \pi/2$, то выражение (4) можно разложить в ряд по K , δ , δ_1 . Пренебрегая членами порядка vK^5 и $(v^3/M^2)K^3$, которые меньше членов, удерживаемых в дальнейшем, получим

$$z_1 = - \left\{ vK \left[\left(\frac{x^2}{v^2} - 1 \right) + \left(\frac{x^2}{v^2} - 1 \right)^2 + \left(\frac{x^2}{v^2} - 1 \right)^3 + \dots \right] - \right. \\ \left. - vK \left[\frac{x^2}{M^2} + 2 \frac{x^4}{M^4} + 4 \frac{x^6}{M^6} + \dots \right] - \frac{4}{3} vK^3 + \dots \right\}. \quad (5)$$

Если разложить выражения в квадратных скобках при vK и $-vK$ в ряд по $(v/n) \sin^2 \vartheta$ (при этом $\vartheta \sim \pi/2$) и удерживать в разложении члены до $[(v/n) \sin^2 \vartheta]^8$ включительно, то оба разложения в скобках совпадут. Следовательно, до тех пор, пока $[(v/n) \sin^2 \vartheta]^9 vK \ll vK^3$ (что совпадает² с $v/n \ll 1$), если принять во внимание соотношения:

$$\frac{x^2}{v^2} = 1 + \frac{4n^2\beta^2}{v^2 \sin^2 \vartheta} \left[2 - \frac{v}{n\beta^2} (1 + \beta^2 \sin^2 \vartheta) - 2 \sqrt{1 - \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta} + \right. \\ \left. + \frac{v}{n\beta^2} \sqrt{1 - \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta} + \frac{v^2}{4n^2\beta^4} \beta^2 \sin^2 \vartheta \right] \quad (6)$$

и

$$\frac{x^4}{v^2 M^2} = \frac{4n^2\beta^4}{v^2 \beta^4 \sin^4 \vartheta} \left[2 - 2 \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta - 2 \sqrt{1 - \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta} + \right. \\ \left. + \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta \sqrt{1 - \frac{v}{n\beta^2} \beta^2 \sin^2 \vartheta} + \frac{v^2}{4n^2\beta^4} \beta^4 \sin^4 \vartheta \right], \quad (7)$$

выражение для z_1 запишется так:

$$z_1 = (v/3) [(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) R]^{3/2}, \quad (8)$$

где

$$R = 1 + \frac{v}{2n} + \frac{5}{16} \frac{v^2}{n^2} + \frac{7}{32} \frac{v^3}{n^3} + \dots \quad (9)$$

² Так, для $v = v_{\text{макс}}$ и $H = 10^4$ Г неравенство $(v/n)^9 vK \ll vK^3$ выполняется до энергии $E \sim 10^{13}$ эВ, для которой $v/n \sim 10^{-2}$. Отсюда видно, что при разложении выражений в скобках в (5) удерживать степени, большие $(v/n)^8$, нет необходимости. При этом $z_1 - z = (v^2/4n) (1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta)^{3/2}$, так как соответствующее классическому случаю $z = (v/3) (1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta)^{3/2}$.

Тогда выражение (3) перепишется следующим образом:

$$I_{mm'} = \frac{1}{\pi V^3} V(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) R K_{1/2} \left\{ \frac{\nu}{3} [(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) R]^{\nu/2} \right\}. \quad (10)$$

При этом важно отметить, что при помощи выражений (6) и (7) можно получить любой член ряда (9).

Подставляя в (2) выражение (10), пренебрегая величинами порядка ν^2/n^2 и делая замену $\nu = 3y / [(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) R]^{\nu/2}$, найдем

$$I = \frac{9e^2 \omega_0^2 \beta^2}{c\pi^2} \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta)^{5/2}} \int_0^\infty y^2 dy \left[1 - \frac{9}{2n} \frac{y}{(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta)^{3/2}} \right] \times \\ \times \left[K_{1/2}^2(y) + \frac{\cos^2 \vartheta}{1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta} K_{3/2}^2(y) \right]. \quad (11)$$

Интегрируя (см. также [4]), получим

$$I = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{c} \left(\frac{E}{\mu c^2} \right)^4 \left[1 - 1,98 \frac{\nu_{\max}}{n} + \dots \right] = \\ = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{c} \left(\frac{E}{\mu c^2} \right)^4 \left[1 - 3,95 \frac{\hbar \omega_{\max}}{E} + \dots \right], \quad (12)$$

где $\nu_{\max} = 3/2 (E/\mu c^2)^3$ — номер гармоники, на которую приходится максимум классического излучения, $\omega_{\max} = \nu_{\max} \omega_0$, $\omega_0 = ceH/E$.

Таким образом попрежнему квантовые поправки к интенсивности излучения светящегося электрона будут порядка $\nu_{\max}/n$ и станут существенными при энергиях (см. также [5])

$$E \sim \hbar \omega_{\max}.$$

Основная идея наших вычислений [1] — аппроксимация полиномов Сонина — Лагерра через функцию $K_{1/2}$, исходя из дифференциального уравнения, — использована также (правда, без ссылки на [1]) в работе [4], в которой получено и выражение (12). Однако вследствие менее удачного выбора исходного дифференциального уравнения расчеты работы [4] имеют крайне узкий предел применимости ($E < 10^9$ eV для $\nu = \nu_{\max}$ и $H = 10^4$ G), так как они ограничены величинами не порядка ν^2/n^2 , как утверждается в [4], а порядка ν^3/n^2 . Действительно, подставляя формулу (18) работы [4]

$$\varepsilon = (1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) + O \left(\frac{\nu^2}{n^2}, \frac{\nu^3}{n^3}, \dots \right) \quad (A)$$

в главное выражение (16) той же работы, получим

$$I_{mm'} \approx \frac{1}{\pi V^3} V(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) + O \left(\frac{\nu^2}{n^2} \right) \times \\ \times K_{1/2} \left\{ \frac{\nu}{3} \left[(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) + O \left(\frac{\nu^2}{n^2} \right) \right]^{\nu/2} \right\} = \\ = \left[1 + O \left(\frac{\nu^2}{n^2} \right) \right] \frac{1}{\pi V^3} V(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) \times \\ \times K_{1/2} \left\{ \frac{\nu}{3} \left[(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta) \left(1 + \frac{\nu}{2n} \right) \right] \right\}. \quad (B)$$

Последнее выражение совпадает с соответствующей формулой (16) работы [4] лишь в том случае, если $\nu^3/n^2 \ll 1$.

Для расширения пределов применимости расчетов работы [4] надо показать, что в выражении (A) множитель $(1 - \beta^2 \sin^2 \vartheta)$ появится не

только перед членами порядка ν/n , но также и перед всеми членами более высокого порядка (ν^2/n^2 , ν^3/n^3 и т. д.), другими словами, показать, что выражение (А) запишется в виде, аналогичном полученному нами выражению (8) с определенным значением для любого члена ряда R . Такие вычисления в работе [4] не проведены.

В отличие от работы [4], наши результаты имеют вполне достаточный предел применимости $\nu/n \ll 1$ (совпадающий с $(\nu/n)^9 \nu K \ll \nu K^3$), который лежит в области больших энергий (для $\nu = \nu_{\text{макс}}$ и $H = 10^4$ Г, $E \sim 10^{13}$ эВ).

2. Для выяснения роли спина в излучении светящегося электрона надо учесть, что электрон описывается уравнением Дирака. Проводя аналогичные расчеты для этого случая, мы придем к выражению для интенсивности излучения

$$I = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{c} \left(\frac{E}{\mu c^2} \right)^4 S \left[1 - 1,98 \frac{\nu_{\text{макс}}}{n} + \dots \right], \quad (13)$$

отличающемся от выражения (12) множителем

$$S \approx 1 + (\mu c^2 / E)^2. \quad (14)$$

Как видно, спиновые поправки уменьшаются с ростом энергии; уже при энергии $E \sim 5 \cdot 10^7$ эВ спиновые поправки будут ничтожными (в этом случае $\mu^2 c^4 / E^2 \sim 10^{-4}$).

Аналогичное уменьшение роли спина в излучении электрона в области релятивистских энергий имеет место также, например, в случае эффекта Черенкова [6].

В заключение выражаю глубокую благодарность проф. М. А. Маркову за обсуждение изложенного материала.

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

Поступила в редакцию
21 декабря 1953 г.

Литература

- [1] Н. Ф. Нелипа. ДАН СССР, 85, 1259, 1952.—[2] А. А. Соколов. ЖЭТФ, 24, 488, 1953.—[3] Н. Ф. Нелипа. ЖЭТФ, 24, 730, 1953.—[4] А. А. Соколов, Н. П. Клепиков и И. М. Тернов. ЖЭТФ, 24, 249, 1953.—[5] В. В. Владимирский. ЖЭТФ, 18, 392, 1948.—[6] В. Л. Гинзбург. ЖЭТФ, 10, 589, 1940.

РЕШЕНИЕ УПРОЩЕННЫХ УРАВНЕНИЙ ФОКА В ДВУХКОНФИГУРАЦИОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ АТОМОВ ТИПА БЕРИЛЛИЯ

А. П. Юцис, В. В. Кибартас и И. И. Глембоцкий

Уравнения Фока в двухконфигурационном приближении упрощены путем пренебрежения конфигурационным членом в уравнениях, соответствующих уравнениям исследуемой конфигурации, и обменным членом в уравнениях, соответствующих уравнениям учитываемой конфигурации. Приведены решения таких упрощенных уравнений для основной конфигурации ионов V^+ и C^{++} . При помощи решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$ определены значения полной энергии для Be , V^+ и C^{++} и сравнены с опытными данными.

1. Введение

Вопрос о применении метода Фока [1] к определению одноэлектронных волновых функций в многоконфигурационном приближении рассмотрен в [2]. В результате рассмотрения получены уравнения Фока в многоконфигурационном приближении, которым удовлетворяют одноэлектронные волновые функции. Эти уравнения отличаются от обычных уравнений Фока тем, что некоторые из них содержат добавочные члены, которые в [2] названы конфигурационными членами. Появление этих членов приводит к добавочному усложнению и так довольно сложного решения уравнений Фока.

Работа [3] показала, что решение уравнений Фока в двухконфигурационном приближении все же практически выполнимо. Однако вычислительная работа при этом настолько велика, что более широкое применение этого метода представляет большие трудности. Поэтому возникает необходимость искать упрощенные уравнения Фока в многоконфигурационном приближении, решения которых представляли бы приближенные решения точных уравнений Фока в этом же многоконфигурационном приближении.

В настоящей работе мы попытаемся провести это упрощение в случае двухконфигурационного приближения и решить полученные уравнения для основной конфигурации атомов типа бериллия. Случай атомов типа бериллия мы выбрали по той причине, что для атома бериллия имеются решения точных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении, которые приведены в [3]. Наличие этих решений поможет оценить степень приближенности решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении по отношению к решениям соответствующих точных уравнений Фока.

2. Упрощенные уравнения Фока

В случае основной конфигурации атомов типа бериллия уравнения Фока в двухконфигурационном приближении $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$ (сокращенно 1—2) приведены в (2. 5) работы [3]. Эти уравнения можно представить в следующем сокращенном виде:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2V(2s|r) - \epsilon_{(2s, 2s)_{11}} \right] P_1(2s|r) + G(2s|r) + a_{12}K(2s|r) = 0, \quad (1a)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2V(2p|r) - \frac{2}{r^2} - \epsilon_{(2p, 2p)_{11}} \right] P_2(2p|r) + G(2p|r) + \frac{1}{a_{12}}K(2p|r) = 0. \quad (16)$$

только перед членами порядка ν/n , но также и перед всеми членами более высокого порядка (ν^2/n^2 , ν^3/n^3 и т. д.), другими словами, показать, что выражение (A) запишется в виде, аналогичном полученному нами выражению (8) с определенным значением для любого члена ряда R . Такие вычисления в работе [4] не проведены.

В отличие от работы [4], наши результаты имеют вполне достаточный предел применимости $\nu/n \ll 1$ (совпадающий с $(\nu/n)^9 \nu K \ll \nu K^3$), который лежит в области больших энергий (для $\nu = \nu_{\text{макс}}$ и $H = 10^4$ Г, $E \sim 10^{13}$ эВ).

2. Для выяснения роли спина в излучении светящегося электрона надо учесть, что электрон описывается уравнением Дирака. Проводя аналогичные расчеты для этого случая, мы придем к выражению для интенсивности излучения

$$I = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{c} \left(\frac{E}{\mu c^2} \right)^4 S \left[1 - 1,98 \frac{\nu_{\text{макс}}}{n} + \dots \right], \quad (13)$$

отличающемуся от выражения (12) множителем

$$S \approx 1 + (\mu c^2 / E)^2. \quad (14)$$

Как видно, спинные поправки уменьшаются с ростом энергии; уже при энергии $E \sim 5 \cdot 10^7$ эВ спинные поправки будут ничтожными (в этом случае $\mu^2 c^4 / E^2 \sim 10^{-4}$).

Аналогичное уменьшение роли спина в излучении электрона в области релятивистских энергий имеет место также, например, в случае эффекта Черенкова [6].

В заключение выражаю глубокую благодарность проф. М. А. Маркову за обсуждение изложенного материала.

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

Поступила в редакцию
21 декабря 1953 г.

Литература

- [1] Н. Ф. Нелипа. ДАН СССР, 85, 1259, 1952.—[2] А. А. Соколов. ЖЭТФ, 24, 488, 1953.—[3] Н. Ф. Нелипа. ЖЭТФ, 24, 730, 1953.—[4] А. А. Соколов, Н. П. Клепиков и И. М. Тернов. ЖЭТФ, 24, 249, 1953.—[5] В. В. Владимирский. ЖЭТФ, 18, 392, 1948.—[6] В. Л. Гинзбург. ЖЭТФ, 10, 589, 1940.

РЕШЕНИЕ УПРОЩЕННЫХ УРАВНЕНИЙ ФОКА В ДВУХКОНФИГУРАЦИОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ АТОМОВ ТИПА БЕРИЛЛИЯ

А. П. Юцис, В. В. Кибартас и И. И. Глембоцкий

Уравнения Фока в двухконфигурационном приближении упрощены путем пренебрежения конфигурационным членом в уравнениях, соответствующих уравнениям исследуемой конфигурации, и обменным членом в уравнениях, соответствующих уравнениям учитываемой конфигурации. Приведены решения таких упрощенных уравнений для основной конфигурации ионов B^+ и C^{++} . При помощи решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$ определены значения полной энергии для Be, B^+ и C^{++} и сравнены с опытными данными.

1. Введение

Вопрос о применении метода Фока [1] к определению одноэлектронных волновых функций в многоконфигурационном приближении рассмотрен в [2]. В результате рассмотрения получены уравнения Фока в многоконфигурационном приближении, которым удовлетворяют одноэлектронные волновые функции. Эти уравнения отличаются от обычных уравнений Фока тем, что некоторые из них содержат добавочные члены, которые в [2] названы конфигурационными членами. Появление этих членов приводит к добавочному усложнению и так довольно сложного решения уравнений Фока.

Работа [3] показала, что решение уравнений Фока в двухконфигурационном приближении все же практически выполнимо. Однако вычислительная работа при этом настолько велика, что более широкое применение этого метода представляет большие трудности. Поэтому возникает необходимость искать упрощенные уравнения Фока в многоконфигурационном приближении, решения которых представляли бы приближенные решения точных уравнений Фока в этом же многоконфигурационном приближении.

В настоящей работе мы попытаемся провести это упрощение в случае двухконфигурационного приближения и решить полученные уравнения для основной конфигурации атомов типа бериллия. Случай атомов типа бериллия мы выбрали по той причине, что для атома бериллия имеются решения точных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении, которые приведены в [3]. Наличие этих решений поможет оценить степень приближенности решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении по отношению к решениям соответствующих точных уравнений Фока.

2. Упрощенные уравнения Фока

В случае основной конфигурации атомов типа бериллия уравнения Фока в двухконфигурационном приближении $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$ (сокращенно 1—2) приведены в (2. 5) работы [3]. Эти уравнения можно представить в следующем сокращенном виде:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2V(2s|r) - \varepsilon_{(2s, 2s)_{11}} \right] P_1(2s|r) + G(2s|r) + a_{12}K(2s|r) = 0, \quad (1a)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2V(2p|r) - \frac{2}{r^2} - \varepsilon_{(2p, 2p)_{11}} \right] P_2(2p|r) + G(2p|r) + \frac{1}{a_{12}}K(2p|r) = 0. \quad (16)$$

Таблица 1

Нормированные радиальные волновые функции для основной конфигурации ионов B^+ и C^{++}

r	B^+			C^{++}		
	$P(1s r)$	$P(2s r)$	$P_2(2p r)$	$P(1s r)$	$P(2s r)$	$P_2(2p r)$
0,00	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,01	0,1984	0,0441	0,0003 ₂	0,2612	0,0645	0,0006 ₄
0,02	0,3775	0,0838	0,0012 ₀	0,4921	0,1214	0,0025 ₄
0,03	0,5388	0,1195	0,0028	0,6954	0,1713	0,0054
0,04	0,6837	0,1514	0,0048	0,8737	0,2147	0,0094
0,05	0,8134	0,1797	0,0073	1,0292	0,2521	0,0143
0,06	0,9292	0,2048	0,0103	1,1641	0,2839	0,0200
0,07	1,0320	0,2268	0,0137	1,2804	0,3107	0,0266
0,08	1,1230	0,2458	0,0175	1,3797	0,3327	0,0338
0,09	1,2034	0,2621	0,0217	1,4638	0,3504	0,0417
0,10	1,2731	0,2759	0,0262	1,5340	0,3641	0,0501
0,11	1,3340	0,2875	0,0311	1,5918	0,3741	0,0590
0,12	1,3864	0,2969	0,0362	1,6383	0,3808	0,0685
0,13	1,4309	0,3041	0,0416	1,6747	0,3844	0,0784
0,14	1,4684	0,3094	0,0473	1,7021	0,3851	0,0887
0,15	1,4993	0,3130	0,0532	1,7213	0,3832	0,0994
0,16	1,5243	0,3150	0,0594	1,7332	0,3791	0,1105
0,17	1,5439	0,3155	0,0657	1,7386	0,3727	0,1218
0,18	1,5584	0,3145	0,0723	1,7382	0,3642	0,1334
0,19	1,5684	0,3122	0,0790	1,7327	0,3539	0,1452
0,20	1,5742	0,3087	0,0859	1,7226	0,3421	0,1573
0,22	1,5749	0,2984	0,1002	1,6907	0,3139	0,1820
0,24	1,5632	0,2841	0,1151	1,6464	0,2809	0,2074
0,26	1,5414	0,2663	0,1304	1,5927	0,2439	0,2332
0,28	1,5115	0,2457	0,1462	1,5322	0,2038	0,2594
0,30	1,4749	0,2229	0,1623	1,4670	0,1613	0,2858
0,32	1,4333	0,1981	0,1787	1,3987	0,1171	0,3123
0,34	1,3879	0,1716	0,1954	1,3238	0,0715	0,3388
0,36	1,3396	0,1437	0,2123	1,2583	0,0252	0,3652
0,38	1,2892	0,1149	0,2293	1,1881	-0,0214	0,3914
0,40	1,2377	0,0851	0,2464	1,1190	-0,0680	0,4174
0,42	1,1855	0,0548	0,2637	1,0515	-0,1143	0,4431
0,44	1,1332	0,0241	0,2810	0,9860	-0,1601	0,4683
0,46	1,0811	-0,0069	0,2982	0,9229	-0,2052	0,4932
0,48	1,0296	-0,0379	0,3155	0,8623	-0,2493	0,5175
0,50	0,9791	-0,0689	0,3327	0,8044	-0,2923	0,5413
0,52	0,9298	-0,0997	0,3498	0,7493	-0,3340	0,5644
0,54	0,8818	-0,1302	0,3668	0,6970	-0,3743	0,5869
0,56	0,8351	-0,1603	0,3836	0,6476	-0,4132	0,6088
0,58	0,7900	-0,1900	0,4003	0,6010	-0,4507	0,6299
0,60	0,7467	-0,2191	0,4168	0,5571	-0,4866	0,6502
0,65	0,6455	-0,2895	0,4570	0,4591	-0,5693	0,6975
0,70	0,5553	-0,3554	0,4955	0,3763	-0,6418	0,7396
0,75	0,4755	-0,4166	0,5320	0,3071	-0,7039	0,7763
0,80	0,4055	-0,4727	0,5663	0,2497	-0,7563	0,8072
0,85	0,3449	-0,5235	0,5982	0,2024	-0,7993	0,8327
0,90	0,2922	-0,5690	0,6275	0,1636	-0,8334	0,8526
0,95	0,2470	-0,6094	0,6540	0,1318	-0,8593	0,8672
1,00	0,2084	-0,6447	0,6777	0,1060	-0,8777	0,8766
1,05	0,1754	-0,6751	0,6986	0,0851	-0,8893	0,8812
1,10	0,1474	-0,7010	0,7167	0,0682	-0,8947	0,8813
1,15	0,1237	-0,7227	0,7319	0,0545	-0,8948	0,8772
1,20	0,1036	-0,7401	0,7443	0,0435	-0,8902	0,8693
1,25	0,0867	-0,7539	0,7541	0,0348	-0,8814	0,8580
1,30	0,0724	-0,7640	0,7611	0,0278	-0,8690	0,8437
1,35	0,0604	-0,7708	0,7657	0,0221	-0,8535	0,8267
1,40	0,0504	-0,7748	0,7678	0,0176	-0,8353	0,8075
1,45	0,0420	-0,7760	0,7677	0,0139	-0,8151	0,7863
1,50	0,0350	-0,7747	0,7655	0,0110	-0,7931	0,7634
1,55	0,0292	-0,7712	0,7613	0,0087	-0,7697	0,7393

Таблица 1 (продолжение)

r	B^+			C^{++}		
	$P(1s r)$	$P(2s r)$	$P_2(2p r)$	$P(1s r)$	$P(2s r)$	$P_2(2p r)$
1,6	0,0244	-0,7657	0,7553	0,0069	-0,7452	0,7142
1,7	0,0169	-0,7495	0,7384	0,0043	-0,6940	0,6619
1,8	0,0118	-0,7276	0,7159	0,0027	-0,6414	0,6084
1,9	0,0082	-0,7014	0,6890	0,0017	-0,5890	0,5551
2,0	0,0057	-0,6721	0,6589	0,0011	-0,5377	0,5032
2,1	0,0040	-0,6406	0,6263	0,0007	-0,4883	0,4534
2,2	0,0027	-0,6077	0,5922	0,0004	-0,4414	0,4064
2,3	0,0019	-0,5741	0,5572	0,0003	-0,3975	0,3626
2,4	0,0013	-0,5403	0,5219	0,0002	-0,3566	0,3221
2,5	0,0009	-0,5068	0,4870	0,0001	-0,3188	0,2850
2,6	0,0006	-0,4739	0,4528	0,0001	-0,2841	0,2512
2,7	0,0004	-0,4419	0,4195		-0,2525	0,2207
2,8	0,0003	-0,4111	0,3874		-0,2238	0,1934
2,9	0,0002	-0,3815	0,3567		-0,1979	0,1689
3,0	0,0001	-0,3533	0,3278		-0,1746	0,1472
3,2	0,0001	-0,3011	0,2747		-0,1352	0,1110
3,4		-0,2550	0,2282		-0,1039	0,0830
3,6		-0,2146	0,1881		-0,0793	0,0616
3,8		-0,1797	0,1540		-0,0602	0,0455
4,0		-0,1497	0,1255		-0,0455	0,0335
4,2		-0,1243	0,1018		-0,0342	0,0245
4,4		-0,1027	0,0821		-0,0256	0,0179
4,6		-0,0846	0,0660		-0,0191	0,0131
4,8		-0,0696	0,0529		-0,0143	0,0096
5,0		-0,0570	0,0422		-0,0106	0,0071
5,2		-0,0466	0,0336		-0,0079	0,0052
5,4		-0,0381	0,0267		-0,0059	0,0038
5,6		-0,0310	0,0212		-0,0043	0,0028
5,8		-0,0253	0,0168		-0,0032	0,0021
6,0		-0,0206	0,0133		-0,0024	0,0015
6,5		-0,0126	0,0076		-0,0012	0,0007
7,0		-0,0075	0,0042		-0,0005	0,0003
7,5		-0,0046	0,0024		-0,0003	0,0002
8,0		-0,0027	0,0013		-0,0001	0,0001
8,5		-0,0017	0,0008			
9,0		-0,0010	0,0004			
9,5		-0,0006	0,0002			
10,0		-0,0003	0,0001			
10,5		-0,0002	0,0001			
11,0		-0,0001				

Уравнения для функций $P_1(1s|r)$ и $P_2(1s|r)$ сохраняют форму одноконфигурационного приближения. При этом считается, что эти функции практически равны между собой. В (1) $V(nl|r)$ обозначает выражение для экранированного потенциала, $G(nl|r)$ представляет обменный член, а третий член в левых частях (1) является конфигурационным членом.

Влияние конфигурационного члена на решения уравнений (1) главным образом определяется множителем при $K(nl|r)$. Ввиду того что $K(nl|r)$ по порядку величины равно обменному члену и $a_{12} < 1$, в уравнении (1a) конфигурационный член имеет меньшее влияние на решение, чем обменный член, в то время как в уравнении (1б) конфигурационный член имеет гораздо большее влияние на решение, чем обменный член. В случае атома бериллия $a_{12} = 0,33$, и, следовательно, в (1б) конфигурационный член имеет примерно в 9 раз большее влияние, чем в (1a). На самом деле результаты табл. 1 работы [3] показывают, что максимальное изменение решения уравнения (1a) из-за появления конфигурационного члена по абсолютной величине равно 0,0160. Далее, сравнение результа-

Таблица 2

Значения множителей Лагранжа, радиальных интегралов и энергии* для основной конфигурации Be, B⁺ и C⁺⁺ (в ат. ед.)

	Be	B ⁺	C ⁺⁺
$\epsilon_{1s, 1s}$	9,470 ₅	16,371 ₈	25,295 ₀
$\epsilon_{2s, 2s}$	0,6183	1,7478	3,3896
$\epsilon_{(2p, 2p)_{22}}$	0,9623	2,2683	4,1032
$F_0(1s, 1s)$	2,2731	2,8962	3,5196
$F_0(2s, 2s)$	0,3429	0,5037	0,6596
$F_0(1s, 2s)$	0,4805	0,7026	0,9193
$G_0(1s, 2s)$	0,0250	0,0459	0,0676
$F_0(2p, 2p)_{22}$	0,3540	0,5280	0,7000
$F_2(2p, 2p)_{22}$	0,1754	0,2612	0,3450
$F_0(1s, 2p)_{22}$	0,4791	0,7115	0,9424
$G_1(1s, 2p)_{22}$	0,0250	0,0548	0,0896
$G_1(2s, 2p)_{12}$	0,2286	0,3336	0,4284
a_{12}	0,33	0,30	0,29
ΔE	-0,044	-0,058	-0,070
$E \begin{cases} a \\ b \\ в \end{cases}$	-14,577	-24,238	-36,406
	-14,621	-24,296	-36,476
	-14,666	-24,347	-36,534

Примечание. а — в одноконфигурационном приближении, б — в двухконфигурационном приближении, в — экспериментальные данные.

тов табл. 1 работы [3] с результатами табл. 1 работы [4] показывает, что конфигурационный член в уравнении приводит к максимальному изменению решения на 0,1375. Это показывает, что пренебрежение конфигурационным членом в (1а) повлияло бы на решение незначительно. С другой стороны, пренебрежение конфигурационным членом в (1б) внесло бы существенные изменения в решение этого уравнения. Однако в (1б) пренебрежение обменным членом повлияло бы на решение незначительно.

На основании приведенных выше рассуждений мы упрощаем уравнения Фока в двухконфигурационном приближении таким образом, что для исследуемой конфигурации решаем обычные (одноконфигурационные) уравнения Фока, а для волновой функции $P_2(2p|r)$ учитываемой конфигурации — уравнения с учетом конфигурационного члена, однако без обменного члена. Такое упрощение вносит несущественные изменения в результаты, однако значительно сокращает вычислительную работу. Соответствующие расчеты для нейтрального атома бериллия показали, что функция $P_2(2p|r)$ изменилась по абсолютной величине не больше чем на 0,0184. Значение энергии, определенное при помощи решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении, уменьшилось по абсолютной величине лишь на 0,001 ат. ед. по сравнению с ее значением, определенным при помощи решений точных уравнений Фока в этом же приближении. Исследование результатов работы [6] приводит к заключению, что это изменение в значении полной энергии должно уменьшаться с увеличением заряда ядра в изоэлектронных системах типа бериллия.

3. Решения упрощенных уравнений Фока для ионов B⁺ и C⁺⁺

Проведенное в предыдущем разделе упрощение уравнений Фока в двухконфигурационном приближении дает то преимущество, что при решении полученных уравнений главную часть работы будет составлять

решение обычных уравнений Фока для исследуемой конфигурации, которое должно быть проведено с применением обычного (в одноконфигурационном приближении) самосогласованного поля Фока. Дополнительно к этому следует решать уравнения для тех радиальных волновых функций учитываемой конфигурации, квантовые числа которых отличаются от квантовых чисел исследуемой конфигурации. Это значит, что в случае двухконфигурационного приближения $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$ атомов типа бериллия следует решать уравнения Фока в одноконфигурационном приближении для конфигурации $1s^2 2s^2$ и одно добавочное уравнение с учетом конфигурационного члена и с пренебрежением обменным членом для волновой функции $P_2(2p | r)$ учитываемой конфигурации.

Уравнения Фока в одноконфигурационном приближении для основной конфигурации B^+ решены обычным методом в предположении, что недиагональный множитель Лагранжа исчезает. Полученные решения приведены в табл. 1, причем ортогональность функций обеспечена непосредственной ортогонализацией после каждого решения уравнений. В случае C^{++} соответствующие решения приведены в [6]. Однако поскольку они даны там в такой форме, которая затрудняет их использование, соответствующие решения также включены в табл. 1. Уравнения для $P_2(2p | r)$ решены таким же путем, как и в [3], причем в качестве исходных функций использованы значения соответствующих аналитических функций, описанных в [5]. Полученные решения приведены в табл. 1. Решение уравнений Фока для основной конфигурации доведено до степени самосогласованности $\eta = 0,0020$ (ср. формулу (2.8) работы [4]), а для $P_2(2p | r)$ — до $\eta = 0,0070$. Значения множителей Лагранжа и константы a_{12} приводятся в табл. 2.

4. Численное определение энергии

Полная энергия атома при помощи решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении определяется тем же способом, как и в случае решений точных уравнений Фока в таком же приближении [3]. Некоторые изменения происходят из-за отпадания конфигурационного члена в уравнении (2. 5а) работы [3] и обменного члена в (2. 5б). По этой причине в (4. 5) работы [3] следует опустить член с $G_1(2s, 2p)_{12}$, а в правой части (4. 6) следует добавить член $\frac{2}{3}G_1(1s, 2p)_{22}$ со знаком минус.

В табл. 2 приводятся значения множителей Лагранжа, радиальных интегралов и энергии для основной конфигурации Be , B^+ и C^{++} , полученные при помощи решений упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении $1s^2 2s^2 - 1s^2 2p^2$. При всех величинах двойные значки 11 опускаются, так как значения соответствующих величин в данном приближении совпадают с их значениями, полученными в одноконфигурационном приближении. В табл. 2 включены также и экспериментальные значения энергии, взятые из [7].

5. Выводы

Общее рассмотрение и практические расчеты показали, что решение упрощенных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении требует небольшой дополнительной вычислительной работы после получения решений уравнений Фока в одноконфигурационном приближении для исследуемой конфигурации.

Сравнение результатов табл. 2 с результатами табл. 2 работы [3] показывает, что в случае атома бериллия переход от решений точных уравнений Фока в двухконфигурационном приближении к решениям упрощенных уравнений Фока влечет за собой изменение в значении полной энергии лишь на 0,001 ат. ед.

Из табл. 2 видно, что поправка к энергии на двухконфигурационное приближение ΔE покрывает примерно половину разности между опытным значением энергии и соответствующим значением, полученным при помощи самосогласованного поля Фока в одноконфигурационном приближении.

Физико-технический институт
Академии наук Литовской ССР
Вильнюсский государственный университет

Поступила в редакцию
29 декабря 1953 г.

Литература

- [1] В. А. Фок. *ZS. f. Phys.*, 61, 126, 1930.— [2] А. П. Юцис. *ЖЭТФ*, 23, 129, 1952.— [3] В. В. Кибартас и А. П. Юцис. *ЖЭТФ*, 25, 264, 1953.— [4] А. П. Юцис и Г. К. Цюнайтис. *ЖЭТФ*, 23, 512, 1952.— [5] В. И. Кавецкис и А. П. Юцис. *ЖЭТФ*, 25, 257, 1953.— [6] А. Юцис. *Proc. Roy. Soc., A.*, 170, 59, 1939.— [7] M. Morse, L. A. Joung a. E. S. Haurwitz. *Phys. Rev.*, 48, 948, 1935.
-

ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ ДЛЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКОГО ИЗУЧЕНИЯ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ

Н. Г. Басов и А. М. Прохоров

Разобраны методы использования молекулярных пучков для исследования вращательных спектров молекул. Применение молекулярных пучков позволяет получать узкие спектральные линии с шириной ~ 7 кГц и дает возможность изучать вращательные спектры веществ, которые при нормальных условиях находятся в твердом состоянии.

Введение

Большим ограничением применения радиоспектроскопического метода для исследования вращательных спектров молекул является то, что вращательными спектрами обладают только вещества, находящиеся в газообразном состоянии. Практически необходимо иметь давление паров исследуемого вещества $\sim 10^{-2}$ мм рт. ст., так как при более низких давлениях уменьшается интенсивность линий. Таким образом для исследования вращательных спектров твердых при нормальных условиях веществ необходимо нагревать поглощающую ячейку спектрографа до такой температуры, при которой упругость паров исследуемого вещества достигает давления $\sim 10^{-2}$ мм рт. ст. Такой путь исследования ведет к потере разрешающей силы радиоспектрографа, так как нагревание вещества ведет к расширению спектральных линий из-за эффекта Допплера и соударений молекул со стенками поглощающей ячейки.

Следует отметить, что исследование твердых соединений представляет особый интерес, так как для многих элементов неизвестно достаточно простых газообразных соединений, обладающих дипольными моментами. Большинство же твердых ионных соединений имеют большие дипольные моменты, т. е. могут быть исследованы радиоспектроскопическим методом. Например, для элементов группы редких земель неизвестны газообразные соединения, при помощи которых можно было бы определить ядерные моменты этих элементов.

Ширина спектральных линий может быть существенно уменьшена, если наблюдать поглощение микроволн не в газе, как это делается в радиоспектрографах, а в молекулярном пучке. Ширина линий «мономатического» по скоростям молекулярного пучка определяется временем пролета молекул в поле микроволнового излучения. Например, если длина пролета молекул в поле равна 1 см и скорость молекул равна 500 м/сек., то полуширина линий получается равной

$$\Delta\nu = 1/2\pi\tau = 8 \text{ кГц}, \quad (1)$$

где τ — время пролета молекул в поле излучения.

Ввиду того что скорости молекул в пучке не одинаковы, казалось бы, что необходимо в пучке также учитывать и доплеровское расширение. От доплеровского расширения линий в немоматическом по скоростям пучке молекул можно избавиться, если в объемном резонаторе или волноводе возбуждать такие типы волн, у которых фазовая скорость в направлении распространения пучка равна бесконечности. Это вытекает

из того, что смещение частоты, как можно показать, определяется отношением скорости молекул пучка к фазовой скорости волн в направлении распространения пучка¹.

1. Молекулярный пучок

Число молекул, вылетающих из щели источника молекулярного пучка в одну секунду, равно

$$N = \frac{1}{4} n \bar{v} a, \quad (2)$$

где $\bar{v} = \sqrt{8kT/\pi M}$ есть средняя скорость молекул пучка; n — плотность молекул внутри источника молекулярного пучка; a — площадь щели источника; M — масса молекулы.

Число молекул пучка, падающих нормально на площадь S в направлении, перпендикулярном плоскости щели источника, равно

$$N_S = (N/\pi r^2) S, \quad (3)$$

где r — расстояние между площадью S и щелью источника.

Из этого числа молекул на вращательном уровне, характеризуемом квантовым числом вращательного момента J и колебательным квантовым числом v , находится следующее число молекул:

$$N_{Jv} = N_S \frac{g_J \exp \{-E_J/kT\}}{Q_{\text{вр}}} \frac{g_v \exp \{-E_v/kT\}}{Q_{\text{кол}}}, \quad (4)$$

где E_J — вращательная энергия молекулы; g_J — статистический вес вращательного состояния; $Q_{\text{вр}}$ — вращательная статистическая сумма; E_v — колебательная энергия молекулы; g_v — статистический вес колебательного состояния; $Q_{\text{кол}}$ — колебательная статистическая сумма.

При пропускании пучка молекул через высокочастотное поле частоты $\nu = (E_{J+1} - E_J)/h$ в поглощении энергии принимает участие число молекул, равное

$$N_{\text{акт}} = g_J \left(\frac{N_{Jv}}{g_J} - \frac{N_{J+1v}}{g_{J+1}} \right) \approx N_{Jv} \frac{h\nu}{kT}. \quad (5)$$

Последнее равенство имеет место потому, что для микроволновой области $h\nu \ll kT$.

Таким образом, вследствие почти одинаковой населенности вращательных уровней E_J и E_{J+1} , в поглощении микроволновой энергии принимает участие лишь $h\nu/kT$ часть молекул от полного числа молекул, находящихся на уровне E_{Jv} . Молекулы, которые принимают участие в поглощении энергии, мы будем в дальнейшем называть активными молекулами.

Вследствие того, что молекулы в молекулярном пучке не взаимодействуют, нарушение распределения молекул по энергетическим уровням не восстанавливается. Это дает возможность увеличить число активных молекул, производя их сортировку по вращательным состояниям. Сортировку молекул по различным вращательным состояниям можно получить, если пропускать молекулярный пучок через неоднородное электрическое поле с градиентом поля, направленным перпендикулярно направлению распространения пучка. Благодаря тому, что проекция эффективного ди-

¹ Следует заметить, что доплеровское расширение линий молекул газа, заполняющего объемный резонатор или волновод, равно доплеровскому расширению линий газа в свободном пространстве.

полного момента на направление внешнего поля зависит от квантового числа J и его проекции на внешнее поле M_J , молекулы, находящиеся в различных вращательных состояниях, отклоняются неоднородным электрическим полем по-разному, а следовательно, можно выделить молекулы, находящиеся в определенном вращательном состоянии. Такой метод сортировки применяется в резонансном методе молекулярных пучков [1]. Применение сортировки молекул дает возможность увеличить число активных молекул в $\sim kT/h\nu$ раз.

Максимальная плотность молекул в пучке определяется из условия, чтобы за время пролета молекулами высокочастотного поля излучения не было столкновений между молекулами пучка. Можно показать, что длина свободного пробега молекул в пучке примерно равна длине свободного пробега молекул в газе, если плотность молекул газа равна плотности молекул пучка.

При применении сортировки молекул по вращательным состояниям максимальная плотность пучка определяется из условия, чтобы не было соударений между молекулами при пролете последних в сортирующем электрическом поле и в поле излучения².

2. Чувствительность спектроסקопа

Чувствительность спектроסקопа определяется уровнем шумов кристаллического детектора, при помощи которого обнаруживается поглощение энергии молекулами газа. Так как при малых мощностях шумы кристалла мало меняются с изменением мощности, падающей на кристалл, то чувствительность спектроסקопа растет с увеличением абсолютной величины поглощенной молекулами мощности. Величина поглощенной молекулами мощности пропорциональна мощности высокочастотного излучения, через которое пролетает молекулярный пучок, если нет эффекта насыщения.

Определим оптимальную величину мощности высокочастотного излучения. Вероятность перехода молекул из состояния m в состояние n под действием излучения за время τ определяется формулой [2]:

$$W_n^m = 1 - e^{-t/\gamma}, \quad (6)$$

где

$$\frac{1}{\gamma} = 8\pi^2 \rho(\nu) |\mu_n^m|^2 / 3h^2 (\Delta\nu), \quad (7)$$

$\rho(\nu)$ — плотность энергии излучения высокочастотного поля; $\Delta\nu$ — полуширина спектральной линии; μ_n^m — матричный элемент дипольного момента молекулы.

Время пребывания молекул в поле излучения определяется величиной τ — временем пролета молекулами пучка высокочастотного поля. Время пребывания молекул в заданном состоянии определяется величиной γ , связанной с плотностью поля излучения $\rho(\nu)$. Если $\gamma < \tau$, то наступает эффект насыщения, при котором ширину спектральной линии будет определять не время пролета τ , а время жизни молекул в заданном состоянии, т. е. γ .

Если $\gamma > \tau$, то за время пролета через высокочастотное поле не все активные молекулы примут участие в поглощении энергии. Оптимальное значение величины $\rho(\nu)$ следует брать такое, при котором $\tau \approx \gamma$; при этом в поглощении примут участие 43% активных молекул³.

² Следует отметить, что газокINETический диаметр соударений молекул меньше микроволнового диаметра соударений.

³ Следует иметь в виду, что при $\tau = \gamma$ линия расширится до $\Delta\nu' = \Delta\nu\sqrt{2}$.

Максимально возможное значение поглощенной энергии получится, когда половина активных молекул перейдет из нижнего состояния в верхнее.

Итак, оптимальная плотность излучения $\rho_{\text{опт}}(\nu)$ определяется равенством

$$\gamma = \tau. \quad (8)$$

Отсюда, учитывая (7) и (1), получим

$$\rho_{\text{опт}}(\nu) = 3h^2(\Delta\nu)^2 / 4\pi |\mu_n^m|^2. \quad (9)$$

При плотности поля $\rho_{\text{опт}}(\nu)$ молекулы пучка поглотят энергию, равную

$$E_{\text{погл}} = 0,43 N_{\text{акт}} h\nu. \quad (10)$$

Следует заметить, что $\rho_{\text{опт}}(\nu)$ для переходов между уровнями с заданными J зависит также от M_J , поэтому в качестве $\rho_{\text{опт}}(\nu)$ следует брать некоторое среднее значение из оптимальных значений для каждой зеемановской компоненты.

Плотность энергии $\rho(\nu)$ в случае применения молекулярных пучков получается значительно меньшей плотности энергии в обычных радиоспектроскопах, так как в случае пучков получаются более узкие линии. Легко показать, что при малых значениях потока энергии применение супергетеродинного приемника дает несомненное преимущество по чувствительности. Если поток мощности равен P , то минимальное обнаруживаемое изменение мощности на фоне шумов при применении супергетеродинного приемника равно

$$\Delta P = 2 \sqrt{P_{\text{шум}} P}, \quad (11)$$

где $P_{\text{шум}}$ — мощность шумов.

Величина мощности шумов для супергетеродинного приемника с полосой пропускания Δf равна

$$P_{\text{шум}} = FkT\Delta f, \quad (12)$$

где F — шум-фактор приемника.

Рассмотрим различные варианты применения молекулярных пучков для изучения вращательных спектров молекул.

3. Спектроскоп с волноводной поглощающей ячейкой

Пусть электромагнитное излучение распространяется вдоль оси ox , причем возбуждается основная волна (рис. 1).

Оптимальная мощность потока энергии, согласно (9), равна

$$P_{\text{опт}} = \{3h^2c(\Delta\nu)^2 / 4\pi |\mu_n^m|^2\} bd, \quad (13)$$

где c — скорость света.

Если через такой волновод пропускать пучок молекул параллельно оси ou , то доплеровское расширение спектральных линий будет отсутствовать, так как фазовая скорость распространения основной волны в этом направлении равна бесконечности. Если используется расходящийся пучок молекул, то необходимо, чтобы доплеровское расширение из-за наличия компоненты скорости молекул u_x давало бы доплеровскую ширину линии, меньшую, чем ширина линии, связан-

ная со временем пролета молекулами поля излучения, т. е.

$$v_x < c / \pi v_0 \sqrt{2\pi \ln 2}. \quad (14)$$

Следовательно, допустимый угол разлета молекул пучка будет

$$\operatorname{tg} \alpha < v_x / v = c / \pi v_0 b \sqrt{2\pi \ln 2}. \quad (15)$$

Выражение (15) показывает, что для наблюдения вращательных линий может быть использована только часть молекул, вылетающих из щели источника пучка.

Если в источнике имеется K вертикальных щелей площади a , то через волновод будет пролетать следующее число активных молекул:

$$N_{\text{акт}} = \beta K N_{Jv} (h\nu / kT), \quad (16)$$

где β есть коэффициент использования молекулярного пучка, определяемый выражением (15) и геометрией установки.

Количество энергии, поглощаемое этими молекулами, согласно (10), равно

$$E = 0,43 \beta K N_{Jv} (h\nu)^2 / kT. \quad (17)$$

Для того чтобы это поглощение энергии могло быть обнаружено, необходимо, согласно (11), выполнение условия

$$P_{\text{шум}} < E^2 / 4P_{\text{опт}}. \quad (18)$$

Величина $P_{\text{опт}}$ определяется (13).

Рассмотрим в качестве примера возможность наблюдения вращательного перехода $J=1 \rightarrow J=2$ молекул CsF. Пусть $K=200$; $\beta=0,03$; $a=10^{-2}$ см²; $b=d=1$ см; $n=10^{15}$; $|\mu_2^1| = 2/3\mu_0^2$; $\mu_0=7,3 \cdot 10^{-18}$ CGSE; $\nu=17700$ мГц; $T=850^\circ\text{C}$, $F=40$, $\Delta f=0,1$ гц. Тогда $\Delta\nu=7$ кГц; $E=3 \cdot 10^{-12}$ В; $P=5 \cdot 10^{-8}$ В; $P_{\text{шум}}=2 \cdot 10^{-22}$ В; $\Delta P_{\text{мин}}=6 \cdot 10^{-14}$ В.

Таким образом можно ожидать превышения сигнала над шумом в 50 раз.

Описанный здесь спектроскоп расходует в течение одного часа 75 г вещества.

В приведенном выше расчете не учитывалась возможность сортировки молекул по вращательным состояниям. Применение сортировки молекул по состояниям рассматривается ниже, когда в качестве поглощающей ячейки используется объемный резонатор.

4. Спектроскоп с объемным резонатором

Пусть в качестве поглощающей ячейки используется прямоугольный резонатор, в котором возбуждается колебание H_{011} . Если пропустить через такой резонатор молекулярный пучок в направлении оси ox , то доплеровского расширения спектральных линий не будет, так как фазовая скорость распространения электромагнитной волны в этом направлении равна бесконечности.

Если использовать расходящийся пучок, то необходимо, чтобы доплеровская ширина линий из-за наличия компонент скорости v_y и v_z была меньше ширины линий, обусловленной временем пролета молекул через резонатор, т. е.

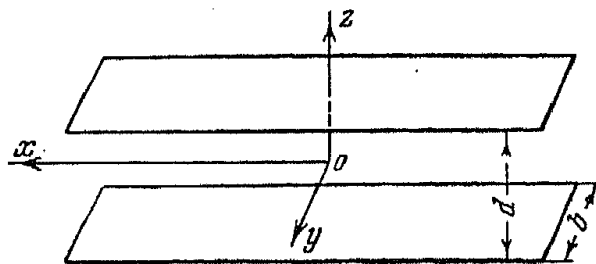


Рис. 1

$$v_r = \sqrt{v_y^2 + v_z^2} < c / \pi r v_0 \sqrt{2\pi \ln 2}. \quad (19)$$

Следовательно, допустимый угол разлета пучка определяется условием

$$\operatorname{tg} \alpha < v_r / v = c / \pi v_0 r \sqrt{2\pi \ln 2}. \quad (20)$$

При выводе (19) и (20) принято, что фазовая скорость волны в направлении оси ou равна фазовой скорости в направлении оси oz .

Для поддержания оптимальной плотности поля $\rho(\nu)$ внутри объемного резонатора в резонатор необходимо вводить энергию $P_{\text{опт}}$

$$P_{\text{опт}} = 2\pi \nu \rho(\nu) bdl / Q = 3h^2 (\Delta\nu)^2 \nu bdl / 2Q |\mu_n^m|^2, \quad (21)$$

где Q — добротность резонатора.

При выводе (21) считалось, что энергия равномерно распределена по объему резонатора. Как видно из (21), вводимая в резонатор энергия уменьшается пропорционально росту Q . Поэтому для увеличения чувствительности спектроскопа, как это следует из (11), нужно увеличить добротность резонатора. Для получения большей добротности резонатора необходимо устранить потери из-за излучения через отверстия в резонаторе, служащие для пропускания пучка молекул. Этого можно достигнуть, используя в

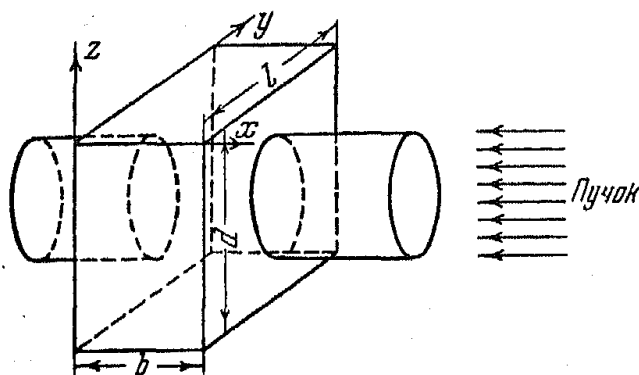


Рис. 2

качестве запорных фильтров отрезки цилиндрических волноводов, критическая волна которых меньше длины волны излучения молекул.

Добротность резонатора может быть значительно повышена путем регенерации при помощи лампы бегущей волны. Добротность резонатора также может быть сделана достаточно большой, если охладить резонатор до сверхпроводящего состояния.

Число активных молекул, получаемых от щели при применении сортировки, равно

$$N_{\text{акт}} = \beta N_{J\nu}, \quad (22)$$

где β — коэффициент использования молекул пучка, определяемый соотношением (20) и геометрией установки.

Количество энергии, поглощаемое этими молекулами, согласно (10), равно

$$E_{\text{погл}} = 0,43 \beta N_{J\nu} h\nu. \quad (23)$$

Для того чтобы это поглощение могло быть обнаружено, необходимо, согласно (11),

$$P_{\text{шум}} < E_{\text{погл}}^2 / 4P_{\text{опт}}. \quad (24)$$

Величина $P_{\text{опт}}$ определяется из равенства (21). Величина шумов определяется (12).

Применение сортировки молекул по вращательным состояниям дает возможность изучать не только спектры поглощения молекул, но и спектры излучения молекул, так как из пучка по желанию можно отсортировать молекулы, находящиеся в нижнем или в верхнем состоянии рассматриваемого перехода.

Используя молекулярный пучок, в котором отсутствуют молекулы в нижнем состоянии рассматриваемого перехода, можно сделать «молекулярный генератор». Принцип действия молекулярного генератора состоит в следующем.

Отсортированный молекулярный пучок, в котором отсутствуют молекулы в нижнем состоянии рассматриваемого перехода, пропускается через объемный резонатор. За время пролета молекул в объемном резонаторе часть молекул переходит из верхнего состояния в нижнее, отдавая энергию объемному резонатору. Если мощность потерь внутри резонатора меньше мощности излучения молекул, то наступает самовозбуждение, при котором мощность в резонаторе растет до величины, определяемой эффектом насыщения. Таким образом самовозбуждение наступит, если

$$N_{\text{акт}} h\nu > E_{\text{пот}}, \quad (25)$$

где $E_{\text{пот}}$ — мощность потерь в объемном резонаторе, а именно

$$E_{\text{пот}} = 2\pi\nu E_{\text{зап}}/Q. \quad (26)$$

Принимая, что энергия в объемном резонаторе равномерно распределена по объему резонатора, запишем $E_{\text{зап}}$ в виде

$$E_{\text{зап}} = \rho(\nu) V, \quad (27)$$

где V — объем резонатора.

На основании (25)–(27) получим условия самовозбуждения в виде:

$$N_{\text{акт}} > 3Vh(\Delta\nu)^2/2Q|\mu_n^m|^2. \quad (28)$$

Стационарное состояние генератора определяется эффектом насыщения. Предельная величина мощности, которая может быть получена от такого генератора, равна

$$E_{\text{макс}} = 1/2 N_{\text{акт}} h\nu. \quad (29)$$

Рассмотрим в качестве примера возможность наблюдения вращательного перехода $J=0 \rightarrow J=1$ молекул CsF . Для получения молекулярного пучка необходима температура 575°K , при которой в нулевом вращательном состоянии ($J=0$) находится 0,00025 часть от полного числа молекул.

При угле раствора пучка в 1° можно получить поток 10^{14} молекул в секунду. Из этих молекул в состоянии $J=0$, $\nu=0$ находится $6 \cdot 10^9$ молекул. Примерно такое же число молекул находится в состоянии $J=1$, $M_J=0$, $\nu=0$. Так как в пучке отсутствуют молекулы в состоянии $J=0$, $\nu=0$, то найденное число молекул является числом активных молекул.

Максимальная энергия, которая может быть излучена в резонатор, равна

$$E_{\text{макс}} = 1,6 \cdot 10^{-14} \text{ W}. \quad (30)$$

Из формулы (28) найдем добротность резонатора, при которой получается самовозбуждение

$$Q > 3Vh(\Delta\nu)^2/2N_{\text{акт}}|\mu_n^m|^2. \quad (31)$$

Пусть $V = 5 \text{ см}^3$, $(\Delta\nu)^2 = 5 \cdot 10^7 \text{ сек.}^{-2}$, тогда в данном случае

$$Q > 7 \cdot 10^6. \quad (32)$$

Так как такой резонатор сделать практически невозможно, то получить самовозбуждение в нашем случае также невозможно. Однако ввиду того, что плотность пучка в нашем случае далеко не является предельной для длины свободного пробега молекул, равной 1 см, режим самовозбуждения можно осуществить при практически достижимых добротностях, значительно повысив плотность молекулярного пучка.

При легко достижимых добротностях $\sim 5 \cdot 10^3$ и при числе активных молекул $\sim 3 \cdot 10^9$ вращательный переход может быть изучен при помощи индуцированного излучения. Найдем величину мощности, которую необходимо иметь для создания в резонаторе оптимальной плотности энергии для индуцированного излучения молекул. Вследствие того, что $|\mu_n^m| = |\mu_m^n|$, величину $P_{\text{опт}}$ можно получить из (21):

$$P_{\text{опт}} = 4,9 \cdot 10^{-11} \text{ W.} \quad (33)$$

Согласно (24), при $F = 40$, $\Delta f = 0,1$ гц минимально обнаруживаемое изменение мощности равно

$$\Delta P_{\text{мин}} = 2 \cdot 10^{-15} \text{ W,} \quad (34)$$

т. е. при указанной плотности пучка получается превышение сигнала над шумом в 7 раз.

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

Поступила в редакцию
19 января 1954 г.

Литература

[1] Н. К. Hughes. Phys. Rev., 72, 614, 1947.— [2] В. Гайтлер. Квантовая теория излучения, ГИТТЛ, 1940.

РАСЧЕТ СПЕКТРА СОБСТВЕННЫХ ПРЕДЕЛЬНЫХ ЧАСТОТ СМЕШАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ

Н. Н. Порфирьева

Рассчитан спектр собственных предельных частот смешанных кристаллов дибромбензола и дихлорбензола при концентрации компонентов 50:50 и 25:75. Произведена оценка коэффициентов упругого взаимодействия между молекулами, колеблющимися в одной фазе.

Введение

Экспериментальные исследования Вукса [1] и Коршунова [2] показали, что спектр комбинационного рассеяния смешанных изоморфных кристаллов парадихлорбензола и парадибромбензола, кристаллизующихся в пространственной группе C_{2h}^5 , во многом подобен спектру чистых компонентов. Частоты смешанных кристаллов расположены между соответствующими частотами чистых компонентов, и при изменении процентного содержания компонентов происходит линейное смещение частот смешанного кристалла. Саксена [3] дал экспериментальную формулу:

$$\nu^2 = \frac{xI_{Cl}\nu_{Cl}^2 + (100-x)I_{Br}\nu_{Br}^2}{xI_{Cl} + (100-x)I_{Br}}, \quad (1)$$

хорошо интерполирующую спектр смешанных кристаллов различной концентрации по спектрам чистых компонентов. Здесь x — процентное содержание парадихлорбензола. Матосси [4] и Саксена [5], пытаясь дать теоретическое обоснование эмпирической формуле, рассчитали собственный спектр смешанного кристалла для одномерного случая, считая, что статистическое расположение молекул отдельных компонентов может быть заменено их правильным чередованием. Расчет, сделанный в духе динамики Борна, показал, что при изменении концентрации компонентов происходит линейное смещение частот смешанного кристалла и для 50% концентрации частота трансляционных колебаний пропорциональна $\sqrt{(1/m_1) + (1/m_2)}$, а частота ориентационных колебаний пропорциональна $\sqrt{(1/I_1) + (1/I_2)}$, где m_1 , m_2 , I_1 и I_2 — массы и моменты инерции молекул компонентов.

Задачей автора являлось рассчитать спектр реального смешанного кристалла парадихлорбензола и парадибромбензола при различных концентрациях компонентов, пользуясь методикой, изложенной в предыдущих работах автора [6]. Аналитический вид полученных частот дал возможность произвести оценку величины коэффициентов упругих связей между молекулами, колеблющимися в одной фазе. Эти коэффициенты для чистых компонентов не могли быть вычислены, так как всегда входили суммарно в выражение для частот.

1. Спектр смешанного кристалла парадихлорбензола и парадибромбензола при 50% концентрации компонентов

Условимся обозначать молекулы парадихлорбензола через ClCl и молекулы парадибромбензола через BrBr. Как уже было сказано выше, спектр смешанного кристалла ClCl и BrBr аналогичен спектрам чистых компонентов, поэтому смешанный кристалл можно считать изоморфным с кристаллами парадихлорбензола и парадибромбензола. Это значит, что он кристаллизуется в пространственной группе C_{2h}^5 с двумя молекулами в элементарной ячейке. Для расчета собственного спектра смешанного кристалла сделаем следующие упрощающие предположения:

1) будем считать, что статистическое расположение молекул двух компонентов при концентрации 50% можно заменить правильным чередованием этих молекул по слоям вдоль оси x (рис. 1);

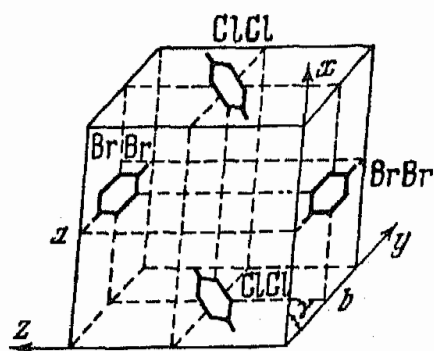


Рис. 1

2) будем рассматривать лишь предельные колебания молекул, т. е. те колебания, при которых молекулы одного сорта колеблются с оди-



Рис. 2

наковой фазой, а молекулы разного сорта с фазой, равной π ;

3) будем считать, что силы взаимодействия между молекулами ClCl и BrBr в положениях a и b (рис. 2) примерно одного порядка; тогда при предельных колебаниях в выражении для энергии исчезнут смешанные члены, содержащие координаты смещения центра тяжести молекул и углы поворотов молекул [7].

Элементарная ячейка такого кристалла содержит две молекулы разного типа и, следовательно, характеризуется 12 координатами. Элементами симметрии рассматриваемого кристалла являются идентичное преобразование E и центр инверсии C_i . Соответствующий расчет, использующий теорию групп [6], дает возможность получить аналитическое выражение 12 собственных частот колебаний кристалла. Из них шесть частот ориентационных колебаний выражаются формулой:

$$\omega_j^2 = \left(A_k \pm \frac{1}{I_1^{(k)} + I_2^{(k)}} \sqrt{(I_1^{(k)} - I_2^{(k)}) A_k^2 + I_1^{(k)} I_2^{(k)} C_k^2} \right) \left(\frac{1}{I_1^{(k)}} + \frac{1}{I_2^{(k)}} \right), \quad (2)$$

где $k = 1, 2, 3$.

Остальные шесть частот трансляционных колебаний имеют вид

$$\omega_7^2 = \omega_8^2 = \omega_9^2 = 0; \quad \omega_{10}^2 = 2(2f + w) \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right).$$

Частоты ω_{11}^2 и ω_{12}^2 находятся из уравнения:

$$\begin{aligned} & \left[\gamma^2 \kappa^2 \left(\frac{m_1 m_2}{4} \right)^2 - \frac{\delta}{4} \left(\frac{m_1 + m_2}{4} \right)^2 \left(2h\kappa - \frac{\delta^2}{4} \right) - \frac{\delta^2}{4} \frac{m_1^2 - m_2^2}{4} \gamma \kappa \right] \omega^4 + \\ & + 2 \left[\gamma \kappa \frac{m_1 m_2}{4} \frac{m_1 + m_2}{4} + \frac{\delta^2}{4} \left(\frac{m_1 + m_2}{4} \right)^2 \right] \left[\kappa (2f\gamma^2 + \beta^2 w) + \gamma \alpha^2 w \right] \omega^2 + \\ & + 4(2f\gamma^2 + \beta^2 w) \gamma \alpha^2 w = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь A_k — суммарный коэффициент упругой связи, характеризующий изменение энергии решетки при повороте на единичный угол всех молекул одного типа, C_k — суммарный коэффициент упругой связи между молекулами разного типа, f — коэффициент упругой связи между ближайшими соседями, т. е. молекулами, принадлежащими одной элементарной ячейке, ω — коэффициент упругой связи между следующими ближайшими соседями, $\alpha, \beta, \gamma, \eta, \kappa, \delta$ — поправки на моноклинную структуру, m_1 и m_2 — массы молекул ClCl и BrBr , $I_1^{(1)}, I_1^{(2)}, I_1^{(3)}$ и $I_2^{(1)}, I_2^{(2)}, I_2^{(3)}$ — моменты инерции молекул ClCl и BrBr относительно трех главных направлений эллипсоида инерции.

Сравнивая полученные выражения для частот с вычисленными в [5] для одномерной решетки, мы видим, что для трансляционных колебаний сохраняется та же закономерность. Для ориентационных колебаний несколько отличный результат обусловлен тем, что автор работы [5], очевидно, в выражении для энергии взаимодействия между молекулами пренебрегает членом, содержащим произведения углов, что является недопустимым, так как этот член по величине одного порядка с остальными.

Найдем теперь численные значения для частот смешанного кристалла, отвечающих ориентационным колебаниям. Трансляционные колебания мы рассматривать не будем, так как они являются оптически неактивными.

В табл. 1 приведены экспериментальные частоты, отвечающие ориентационным колебаниям, взятые из работы Коршунова и Селькина [2].

Таблица 1

	100% ClCl	80% ClCl 20% BrBr	50% ClCl 50% BrBr	20% ClCl 80% BrBr	100% BrBr
ν_1	27,5	24,3	21,6	20,1	20,1
ν_2	48,7	46,8	41,9	39,3	37,4
ν_3	72	71	70	69	68
ν_4	93	93	94	93	93

Частоты ν_1 и ν_2 по предыдущим расчетам [7], видимо, относятся к моменту инерции $I^{(3)}$, равному соответственно для парадихлорбензола и парадибромбензола $I_1^{(3)} = 1384 \cdot 10^{-40}$ г·см²; $I_2^{(3)} = 3182 \cdot 10^{-40}$ г·см². При вычислении соответствующих частот по формуле (2) будем считать, что коэффициенты упругих связей для смешанного кристалла при 50% концентрации чистых компонентов примерно равны соответствующим коэффициентам чистого кристалла парабромхлорбензола. Значения коэффициентов вычислены в работе автора [8] и приведены в табл. 2.

Таблица 2

Момент инерции	Парадихлорбензол		Парабромхлорбензол		Парадибромбензол	
	$A \cdot 10^{12}$ дин·см	$C \cdot 10^{12}$ дин·см	$A \cdot 10^{12}$ дин·см	$C \cdot 10^{12}$ дин·см	$A \cdot 10^{12}$ дин·см	$C \cdot 10^{12}$ дин·см
$I^{(3)}$	3,75	3,74	4,92	4,75	5,83	6,64
$I^{(1)}$	1,87	0,98	1,87	0,98	1,87	0,98

Подставляя значения A , C , $I_1^{(3)}$ и $I_2^{(3)}$ в формулу (2), получим $\nu_2 = 47 \text{ см}^{-1}$, $\nu_1 = 23,8 \text{ см}^{-1}$. Сравнивая с экспериментальными данными Коршунова и Селькина, мы видим, что полученные частоты, в основном, дают хорошее совпадение с опытом. Не совсем полное совпадение экспериментальных и теоретических данных объясняется не вполне точным значением коэффициентов упругих связей A и C , численные значения которых взяты из табл. 2 для чистого кристалла парабромхлорбензола.

Таким образом мы видим, что сделанные в начале работы допущения не изменяют существенно реальной картины и дают возможность объяснить не только качественно, но и количественно собственный спектр смешанных кристаллов.

2. Спектр смешанного кристалла при концентрации компонентов 25:75

Так же, как и при концентрации 50:50, будем считать, что в кристалле статистическое распределение инородных молекул можно заменить их правильным чередованием в плоскости zx (рис. 3). Элементарная ячейка такого кристалла содержит 4 молекулы и, следовательно, характеризуется 24 координатами.

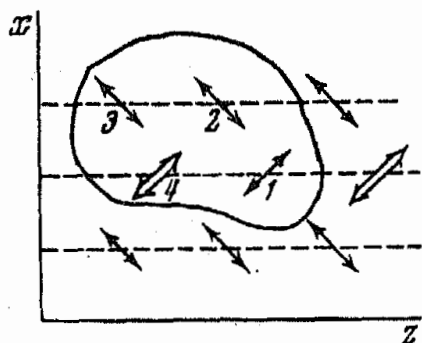


Рис. 3

Группа симметрии кристалла C_1 содержит кроме идентичного преобразования только операцию инверсии.

Так как при наличии операции инверсии трансляционные колебания оптически неактивны, то мы будем рассматривать лишь частоты, отвечающие ориентационным колебаниям. Опуская промежуточные вычисления, напишем уравнения Лагранжа для ориентационных колебаний около главного направления, соответствующего моменту инерции $I^{(3)}$:

$$\begin{aligned} I_1 \ddot{\varphi}_1 + 2A' \varphi_1 + \bar{C}' \varphi_4 + C^* \varphi_2 + C^{**} \varphi_3 &= 0, \\ I_1 \ddot{\varphi}_2 + 2A' \varphi_2 + C' \varphi_3 + C^* \varphi_1 + \bar{C}^{**} \varphi_4 &= 0, \\ I_1 \ddot{\varphi}_3 + 2A' \varphi_3 + C' \varphi_2 + \bar{C} \varphi_4 + C^{**} \varphi_1 &= 0, \\ I_2 \ddot{\varphi}_4 + 2\bar{A} \varphi_4 + \bar{C}' \varphi_1 + \bar{C} \varphi_3 + \bar{C}^{**} \varphi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь A' характеризует упругое взаимодействие основной молекулы в поле ее неподвижных соседей, $\bar{A}'$ — упругое взаимодействие инородной молекулы в поле ее неподвижных соседей, C' характеризует взаимодействие молекул 2 и 3 в плоскости zy , $\bar{C}'$ — взаимодействие молекул 4 и 1 в плоскости zy , C^* и $\bar{C}^*$ характеризуют взаимодействие молекул 1 и 2 и соответственно молекул 4 и 3 в правой диагональной плоскости, C^{**} и $\bar{C}^{**}$ — определяют взаимодействие молекул 1 и 3, 4 и 2 соответственно в левой диагональной плоскости.

Для случая чистых кристаллов $2A' + C' = 2A$ и $C^* + C^{**} = C$.

При решении системы (4) будем рассматривать только предельные колебания, т. е. такие, при которых молекулы 2 и 3 колеблются в одной фазе. Это значит, что смещение φ_2 можно положить равным смещению φ_3 . Так как в полученном Коршуновым спектре нет новых линий по сравнению со спектрами чистых кристаллов, то, видимо, интенсивными являются только те колебания, для которых молекулы 1 и 4 также колеблются в фазе, однако величина смещения в этом

случае неодинакова, и, следовательно, нельзя приравнять φ_1 и φ_4 . Таким образом для вычисления частот мы будем иметь определитель третьего порядка

$$\begin{vmatrix} -I_1\omega^2 + 2A' & C^* + C^{**} & \bar{C}' \\ C^* & -I_1\omega^2 + 2A' + C' & \bar{C}^{**} \\ \bar{C}' & \bar{C}^* + \bar{C}^{**} & -I_2\omega^2 + 2\bar{A}' \end{vmatrix} = 0. \quad (5)$$

Решение уравнения третьей степени в общем виде не является целесообразным и здесь не приводится.

Написанное уравнение было использовано нами также для решения обратной задачи, а именно, для определения коэффициентов упругих связей A' и C' , которые в спектре чистых кристаллов в выражение для предельных частот всегда входят в виде суммы и поэтому не могут быть определены. Значение этих коэффициентов дает возможность оценить примерную ширину оптической ветви.

Определим из уравнения (5) численные значения A' , C' и $\bar{C}'$. Для этого воспользуемся экспериментальными значениями частот, отнесенными к моменту инерции

$I^{(3)}$ для концентрации 25:75, определяя их из табл. 1 путем интерполяции по графику. Величина их дана в табл. 3.

Таблица 3

	75% ClCl и 25% BrBr	25% ClCl и 75% BrBr
$\nu_1, \text{см}^{-1} \dots \dots$	23	20,5
$\nu_2, \text{см}^{-1} \dots \dots$	43	40

Для того чтобы можно было определить искомые коэффициенты, будем считать, что остальные коэффициенты упругих связей, входящие в уравнение (5),

имеют те же значения, что и для чистых кристаллов, т. е. для концентрации 25% BrBr и 75% ClCl

$$\begin{aligned} C^* \approx C^{**} \approx C/2 &= 1,87 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}; \\ 2A' + C' &= 2A = 7,5 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}. \end{aligned} \quad (6)$$

Коэффициенты $\bar{C}^* + \bar{C}^{**} = \bar{C}$ характеризуют взаимодействие молекулы BrBr с молекулами ClCl в диагональных плоскостях. Если предположить, что величина этого взаимодействия такого же порядка, что и между молекулами парабромхлорбензола в чистом кристалле, то тогда

$$\bar{C}^* \approx \bar{C}^{**} = \bar{C}/2 = 2,37 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}.$$

Предположим также, что $\bar{A}' \approx A'$, т. е. что величина этих коэффициентов одного порядка. Такое предположение несколько изменяет истинную величину самих коэффициентов, однако оно не лишено основания, ибо, как показывает расчет, отклонение A'_{ClCl} от A'_{BrBr} составляет 15% самой величины, а, следовательно, отклонение $\bar{A}' = A'_{\text{BrBr}}$ еще меньше. Сделанные предположения дают возможность после подстановки в уравнение (5) частот ω_1^2 и ω_2^2 , взятых из табл. 3 ($\omega^2 = 4\pi^2\nu^2c^2$), получить систему двух уравнений для определения A' и $\bar{C}'$. Величина C' находится из соотношения (6).

Проделанные вычисления дают для A' и C' следующие значения: $A'_{\text{ClCl}} = 6,5 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}$; $C'_{\text{ClCl}} = -5,6 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}$.

Аналогично из соответствующих уравнений для концентрации 75% BrBr и 25% ClCl получаем для A' и C' значения: $A'_{\text{BrBr}} = 7,65 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}$; $C'_{\text{BrBr}} = -3,34 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см}$. В обоих случаях коэффициенты

упругого взаимодействия между молекулами, колеблющимися в одной фазе, получились меньше нуля. Это значит, что для данного типа колебаний ход дисперсионной кривой $\omega(\tau)$, где τ — волновой вектор, подобен акустической ветви трансляционных колебаний — частота колебаний увеличивается с уменьшением волнового вектора. В этом случае энергетически более выгодным является колебание с одинаковой фазой, чем с фазой, равной π .

Анализ, проведенный на колебаниях одномерной решетки в работе Ансельма и Порфирьевой [7], показал, что такой ход дисперсионной кривой характерен для молекул, расположенных в положении равновесия параллельно друг другу. Отрицательный ход дисперсионной кривой имеет место при расположении молекул под углом; в этом случае коэффициент C' положителен.

Согласно данным кристаллографического анализа, молекулы, находящиеся в плоскости zy , расположены таким образом, что главные направления их эллипсоида инерции, характеризующиеся моментом инерции $I^{(3)}$, образуют одинаковый угол с плоскостью zy : то же самое относится и к направлению, характеризующему моментом инерции $I^{(1)}$. Направления, отвечающие моменту инерции $I^{(2)}$ для двух соседних молекул вдоль оси z , расположены под разными углами к плоскости zy . Это значит, что частоты колебаний, связанные с моментами $I^{(1)}$ и $I^{(3)}$, должны содержать отрицательный коэффициент упругой связи C' , а частота ориентационных колебаний, связанная с моментом $I^{(2)}$, — положительный коэффициент C' .

Расчет C' для частот, связанных с моментом инерции $I^{(1)}$, действительно дает отрицательную величину

$$C' = -0,74 \text{ дин} \cdot \text{см.}$$

Интересно, что частоты, отвечающие моменту инерции $I^{(1)} = 150 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$, не изменяются от кристалла к кристаллу (см. табл. 1), следовательно, в этом случае $A'_{\text{SiCl}} = A'_{\text{BrBr}}$ (величина упругого взаимодействия при качании молекулы в поле ее неподвижных соседей не изменяется). Вычисления дают

$$A' = 2,2 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см.}$$

Отсюда $2A = 2A' + C' = 3,76 \cdot 10^{-12} \text{ дин} \cdot \text{см.}$, что полностью совпадает с ранее вычисленным значением [6] (см. табл. 2).

Отрицательная величина коэффициента C' для частот ν_1 и ν_2 полностью определяет их принадлежность к моменту инерции $I^{(3)}$ и, таким образом, разрешает сомнения, возникшие при сопоставлении теоретических формул с экспериментальными данными [8] в работе [6]. К сожалению, отсутствие экспериментальных частот для смешанных кристаллов, связанных с моментом инерции $I^{(2)}$, не дает возможности убедиться в положительной величине этого коэффициента (см. табл. 1).

Таким образом проделанный расчет собственных частот спектра смешанных кристаллов показал, что характер спектра не изменяется при изменении концентрации компонентов. Это обусловлено изоморфностью кристаллов и сохранением, практически при любой концентрации, их единственного элемента симметрии — центра инверсии.

Ленинградский
кораблестроительный институт

Поступила в редакцию
29 января 1954 г.

Литература

- [1] М. Ф. Вукс. Acta phys.-chim. URSS, 6, 327, 1937. — [2] А. В. Коршунов и В. А. Селькин. ЖЭТФ, 22, 576, 1952. — [3] B. D. Saxena. Journ. Chem. Phys., 18, 1653, 1950. — [4] F. Matossi. Journ. Chem. Phys., 19, 161, 1951. — [5] B. D. Saxena. Journ. Chem. Phys., 19, 1481, 1951. — [6] Н. Н. Порфирьева. ЖЭТФ, 22, 590, 1952. — [7] А. И. Ансельм и Н. Н. Порфирьева. ЖЭТФ, 19, 438, 1949. — [8] Е. Ф. Гросс, А. В. Коршунов и В. А. Селькин. ЖЭТФ, 22, 579, 1952.

ОБРАЗОВАНИЕ МЕЗОНОВ ПРИ ПЕРИФЕРИЧЕСКИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ НУКЛОНОВ

В. Т. Хозяинов

Рассмотрен эффект образования псевдоскалярных мезонов с псевдовекторной связью при столкновениях нуклонов, обладающих заданным угловым моментом, в частности случай периферических столкновений. На основе полученных результатов произведена оценка эффективного сечения процесса при больших энергиях.

Необходимым следствием мезонной теории ядерных сил является эффект образования мезонов при столкновениях отдельных нуклонов и нуклонов с ядрами. Проблема образования мезонов тесно связана с общей проблемой ядерных сил и содержит те трудности, которые в настоящее время испытывает мезонная теория. Хотя качественно данное явление понятно в результате многочисленных работ, посвященных этому вопросу, однако все еще не существует удовлетворительного метода вычисления вероятности образования мезонов.

Как теперь ясно [1], π -мезоны описываются псевдоскалярной волновой функцией. Сравнение экспериментальных данных (как по образованию мезонов, так и по рассеянию их на нуклонах) с теорией указывает на необходимость введения псевдовекторной (градиентной) связи нуклонного и мезонного полей [2]. Расчеты, проведенные с градиентной связью в первом исчезающем приближении, дают возможность отчасти понять быстрый рост сечения указанных процессов с ростом энергии.

Однако несостоятельность теории видна уже из того, что рост сечения продолжается при сколь угодно больших начальных энергиях, что приводит к физически бессмысленным результатам. С другой стороны, программа перенормирования расходящихся выражений, разработанная в электродинамике, применима к ограниченному числу видов связей и, в частности, не применима к теории с градиентной связью, так что трудно что-либо сказать о действительной величине параметра разложения в этой теории.

Преодоление указанных трудностей в будущем станет возможным на основе метода, дающего решение радиационных проблем без разложения по степеням постоянной взаимодействия. Однако и в рамках существующей теории могут представлять интерес различные попытки обойти трудности и оценить вероятность образования мезонов при больших энергиях.

Можно думать, что основную ошибку в результат вносит неправильный учет вклада столкновений с малыми взаимными угловыми моментами сталкивающихся частиц (малыми прицельными параметрами). В самом деле, столкновения нуклонов больших энергий при малых прицельных параметрах приводят ко множественному образованию мезонов (что не может быть изучено современной теорией мезонного поля). Известны фотографии событий, связанных с образованием 20 и более частиц одновременно [3]. При этом величина параметра столкновения может быть определена по угловому распреде-

лению возникших частиц. Изотропное распределение указывает, очевидно, на то, что столкновение было приблизительно центральным.

В то же время фотографии событий с относительно небольшим числом частиц и резко неизотропным в системе центра инерции угловым распределением могут быть приписаны столкновениям с большими прицельными расстояниями [4].

Если столкновения нуклонов с большими прицельными параметрами дают меньшее число возникающих частиц, то при увеличении углового момента сталкивающихся частиц мы, вообще говоря, можем приближаться к условиям применимости теории возмущений.

Задачей настоящей работы являются исследование зависимости вероятности процесса от взаимного углового момента сталкивающихся частиц и выяснение роли периферических столкновений (что само по себе представляет теоретический интерес) на примере процесса образования мезонов.

Проводя вычисления в области больших угловых моментов частиц, оказывается возможным найти для данной величины энергии то «критическое» значение прицельного параметра, при котором вероятность становится порядка единицы. Далее, поскольку вклад параметров столкновения, меньших критического, настоящей теорией учитывается неправильно и на самом деле не может приводить к значениям для вероятности, большим единицы, что найдет свое отражение в будущей теории, предлагается не учитывать роста вероятности при малых параметрах. При этом сечение можно, например, приближенно считать геометрическим с радиусом, равным «критическому» прицельному расстоянию.

1. Рассмотрим процесс образования мезонов как эффект третьего порядка в теории возмущений. Мезоны считаем псевдоскалярными. Положим $\hbar = c = 1$ и используем в дальнейшем обычные релятивистские обозначения.

Как следует из самой постановки задачи, начальное состояние мы должны описывать при помощи релятивистской волновой функции системы двух фермионов, соответствующей состоянию с данным взаимным угловым моментом. Удобно задать полный угловой момент J и его проекцию m на ось z . При этом, как известно, возможны четыре независимых состояния системы двух фермионов. Конечное состояние для простоты представим, как обычно, при помощи плоских волн. Плотность конечных состояний $(2\pi)^{-4} d\mathbf{p}_1 dk \delta(E_F - E_A)$ можно записать в релятивистски инвариантном виде:

$$(2\pi)^4 \delta(p_1^0 + p_2^0 - p_1 - p_2 - k) \frac{dk}{(2\pi)^4} 2E_k 2\pi \delta(k^2 - \mu^2) \prod_{i=1}^2 \frac{d\mathbf{p}_i}{(2\pi)^4} 2E_i 2\pi \delta(p_i^2 - M^2),$$

где M — масса нуклона, μ — масса мезона, $p_i^0, \mathbf{p}_i(E_i, \mathbf{p}_i)$ — 4-импульсы начальных и конечных нуклонов ($i = 1, 2$); k — 4-импульс мезона, $k^2 = E_k^2 - \mathbf{k}^2$, $dk = dk dE_k$ и т. д. Если мы нормируем волновые функции условием $\bar{b} b = 1$ (где $\bar{b} = b^* \beta$), то вероятность должна быть умножена на фактор $(M/\text{энергия})$. Соответствующие множители для нуклонов сократятся с множителями в плотности состояний. Множитель E_k сокращается благодаря обычной нормировке волновой функции мезона. Таким образом для вероятности получаем формулу

$$dW = \frac{F}{N} d\rho, \quad (1)$$

где

$$d\rho = (2M)^2 \frac{dp_1}{(2\pi)^4} \frac{dp_2}{(2\pi)^4} \frac{dk}{(2\pi)^4} 2\pi\delta(p_1^2 - M^2) 2\pi\delta(p_2^2 - M^2) 2\pi\delta(k^2 - \mu^2) \times \\ \times (2\pi)^4 \delta(p_1^0 + p_2^0 - p_1 - p_2 - k), \quad (2)$$

а множитель N зависит только от нормировки волновой функции начального состояния. Можно показать [5], что величина F выражается в рассматриваемом случае следующей формулой:

$$F = \frac{1}{4(2j+1)} \sum_{m=-j}^j \sum_{(\chi)} \left| \sum_{\nu_1, \nu_2} \alpha_{jm}^{(\chi)} \mathbb{M} d\mathbf{q} \right|^2 \quad (\chi = S, 0, \pm 1), \quad (3)$$

причем

$$\alpha_{jm}^{(S)}(\mathbf{q}, \nu_1, \nu_2) = \exp \left\{ -\frac{i\pi}{2} (j+2) \right\} \frac{\delta(p-q)}{q^2} \cdot \frac{2\nu_1 \delta_{\nu_1, -\nu_2}}{\sqrt{2}} Y_{jm}(\vartheta_q, \varphi_q), \quad (4)$$

$$\alpha_{jm}^{(\lambda)}(\mathbf{q}, \nu_1, \nu_2) = \exp \left\{ -\frac{i\pi}{2} (j+\lambda+2) \right\} \frac{\delta(p-q)}{q^2} \left[\delta_{\nu_1, \nu_2} + \frac{\delta_{\nu_1, -\nu_2}}{\sqrt{2}} \right] (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-\nu} \quad (5)$$

$$(\lambda = 0, \pm 1; \nu = \nu_1 + \nu_2; \nu_1, \nu_2 = \pm 1/2).$$

Здесь $\mathbb{M}(\mathbf{q}, \nu_1, \nu_2)$ — матричный элемент исследуемого процесса в пространстве импульсов (в системе координат, где покоится центр инерции системы, причем $\mathbf{q}$ — импульс в этой системе, а ν_1 и ν_2 характеризуют спиновые состояния начальных частиц). В этой формуле матричный элемент процесса при заданном начальном угловом моменте представлен в виде суперпозиции матричных элементов, вычисленных при помощи плоских волн. Рассматривается обычно имеющая физический интерес усредненная вероятность, не зависящая от направления начального момента.

Вероятность (1) должна быть, естественно, просуммирована также по спиновым состояниям конечных частиц.

Матричные элементы переходов могут быть написаны непосредственно, следуя диаграммам рис. 1:

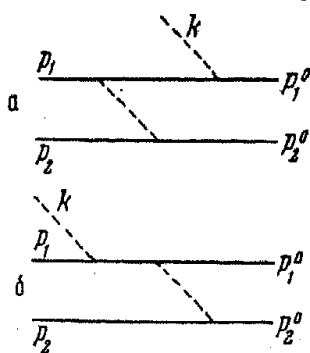


Рис. 1

$$M_a = f_\sigma f_\rho^2 \bar{b}(1) \left[U_1 \frac{\tau_\rho \cdot \hat{1} \cdot \tau_\sigma}{\hat{p}_1^0 - \hat{k} - M} U_2 \right] b(1^0) \bar{b}(2) \tau_\rho U_2 b(2^0) \frac{c^\sigma(k)}{(p_2 - p_2^0)^2 - \mu^2}, \quad (6)$$

$$M_b = f_\pi f_\rho^2 \bar{b}(1) \left[U_2 \frac{\tau_\sigma \cdot \hat{1} \cdot \tau_\rho}{\hat{p}_1 + \hat{k} - M} U_1 \right] b(1^0) \bar{b}(2) \tau_\rho U_2 b(2^0) \frac{c^\sigma(k)}{(p_2 - p_2^0)^2 - \mu^2}, \quad (7)$$

($\hat{p} = p_\mu \gamma_\mu$), причем для двух вариантов взаимодействия 1) псевдоскалярного и 2) псевдовекторного имеем

$$1) U_1 = U_2 = \gamma_5,$$

$$2) U_1 = \frac{1}{\mu} \hat{k} \gamma_5, \quad U_2 = \frac{1}{\mu} (\hat{p}_2 - \hat{p}_2^0) \gamma_5.$$

Используется так называемый четырехмерный формализм изотопического спина [6]: τ_σ ($\sigma = 1, 2, 3, 4$) — матрицы изотопического спина, τ_4 — единичная матрица, f_σ — постоянные связи, c^1 и c^2 — амплитуды, соответствующие заряженным мезонам, c^3 — нейтральным мезонам в симметричной теории, c^4 — «просто» нейтральным мезонам, причем

$f_1 = f_2 = f/\sqrt{2}$. Первый матричный элемент соответствует испусканию реального мезона до обмена виртуальным, второй — испусканию реального мезона после обмена виртуальным. Матричные элементы для диаграмм, соответствующих испусканию реального мезона вторым нуклоном, получаются заменой индексов.

К получающимся, таким образом, четырем диаграммам следует добавить еще четыре аналогичных диаграммы, в которых начальные или конечные нуклоны обменены местами. Как известно, учет этих членов соответствует учету принципа Паули и связанных с ним обменных сил в случае одинаковых частиц. Это дает поправку порядка 50% вблизи порога реакции [2]. Однако в нашем случае при больших энергиях, когда длина волны нуклона $\lambda \ll r_0$ (r_0 — радиус мезонного «облака»), а также при больших угловых моментах, эти силы не могут играть заметную роль, поэтому соответствующие члены отброшены. Тогда точное значение полного матричного элемента есть

$$\mathfrak{M} = i(4\pi)^{1/2}(M_a + M_b) + (1 \longleftrightarrow 2), \quad (8)$$

где $(1 \longleftrightarrow 2)$ означает выражение, полученное из первого простой заменой индексов.

Выражения (6) и (7) могут быть упрощены обычным образом при помощи соотношений, которым удовлетворяют спинорные амплитуды Дирака $(\hat{p} - M)b = \bar{b}(\hat{p} - M) = 0$, законов сохранения и определения обратного оператора Дирака. Записывая матричный элемент $\mathfrak{M}$ в системе центра инерции частиц, получим для

$$H_{jm}^{(x)} = \sum_{\nu_1, \nu_2} \int \alpha_{jm}^{(x)} \mathfrak{M} d\mathbf{q} \quad (9)$$

следующее выражение (псевдовекторная связь):

$$H_{jm}^{(x)} = \frac{i}{4p} \left(\frac{\sqrt{4\pi}}{\mu} \right)^3 \sum_{\nu_1, \nu_2} \int d\Omega \beta_{jm}^{(x)}(\mathbf{n}, \nu_1, \nu_2) \times \\ \times \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1, \sigma_1 \\ \mathbf{p}_2, \sigma_2 \end{pmatrix} \left[\frac{A_1 \hat{k}^{(1)} + B_1}{p_2(\Delta_2 + \mathbf{n}\mathbf{n}_2)} \gamma_5^{(2)} + \gamma_5^{(1)} \frac{A_2 \hat{k}^{(2)} + B_2}{p_1(\Delta_1 - \mathbf{n}\mathbf{n}_1)} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{n} \\ \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь функции A_i и B_i имеют смысл:

$$A_i = \frac{(2M)^3}{k} \left[\frac{T_i}{p(\Delta_k + \mathbf{n}\mathbf{n}_k)} + \frac{T^i}{p_i(\Delta_{hi} - \mathbf{n}_i\mathbf{n}_k)} \right] - 4M(T_i - T^i), \quad (11)$$

$$B_i = (2M)^2(T_i + T^i) \quad (12)$$

($i = 1, 2$; знак минус при $i = 1$, знак плюс при $i = 2$), где

$$\Delta_i = \frac{2EE_i - 2M^2 + \mu^2}{2pp_i}, \quad \Delta_k = \frac{2EE_k - \mu^2}{2pk}, \quad \Delta_{hi} = \frac{2E_iE_k + \mu^2}{2p_i k}, \quad (13)$$

а

$$\mathbf{n}\mathbf{n}_i = \cos \gamma_i = \cos \vartheta \cos \vartheta_i + \sin \vartheta \sin \vartheta_i \cos(\varphi - \varphi_i)$$

— косинус угла на единичной сфере между направлением интегрирования $\mathbf{n}$ и направлением $\mathbf{n}_i$ ($i = 1, 2$) движения одного из нуклонов. Использованы следующие обозначения для «зарядовых» матричных элементов:

$$T_i = c^\sigma(k) f_\sigma f_\rho^2(t_1, t_2 | \tau_\rho^{(1)} \tau_\rho^{(2)} \tau_\sigma^{(i)} | t_1^0, t_2^0), \quad (14)$$

$$T^i = c^\sigma(k) f_\sigma f_\rho^2(t_1, t_2 | \tau_\sigma^{(i)} \tau_\rho^{(1)} \tau_\rho^{(2)} | t_1^0, t_2^0), \quad (15)$$

где $t_i, \{t_i^0$ — «зарядовые» переменные. Кроме того, мы ввели обозначение

$$\alpha_{jm}^{(x)}(q, v_1, v_2) = \frac{\delta(p-q)}{q^2} \beta_{jm}^{(x)}(n, v_1, v_2) \quad (16)$$

и провели интегрирование при помощи δ -функции.

Переход к случаю псевдоскалярной связи осуществляется заменой

$$A_i \rightarrow \frac{T_i}{pk(\Delta_k + nn_k)} + \frac{T^i}{p_i k(\Delta_{ki} - n_i n_k)}; \quad B_i \rightarrow 0.$$

Таким образом матричный элемент для случая псевдовекторной связи равен умноженному на $(2M/\mu)^3$ матричному элементу для псевдоскалярной связи плюс некоторые добавочные члены. Как видно из формул (11) и (12), эти члены располагаются по степеням множителя M . Легко заметить, что наибольший эффект при больших энергиях дает член, пропорциональный M . Этот член отличается от пропорционального, например, M^3 множителем энергии в квадрате. В случае псевдоскалярной связи остается только первый член в (11), что ведет к падению вероятности с ростом энергии.

2. Удобно до интегрирования возвести (10) в квадрат и просуммировать по не интересующим нас спиновым состояниям конечных частиц:

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} |H_{jm}^{(x)}|^2 = \frac{1}{16p^2} \left(\frac{4\pi}{\mu^2}\right)^3 \sum_{\xi=1}^4 I_\xi^{(x)}, \quad (17)$$

причем

$$I_1^{(x)} = \int \frac{\Phi_{IIV}^{(x)} d\Omega' d\Omega}{p_2^2 (\Delta_2 + n' n_2) (\Delta_2 + nn_2)}, \quad I_2^{(x)} = \int \frac{\Phi_{IV I}^{(x)} d\Omega' d\Omega}{p_1^2 (\Delta_1 - n' n_1) (\Delta_1 - nn_1)}, \quad (18)$$

$$I_3^{(x)} = \int \frac{\Phi_{III}^{(x)} d\Omega' d\Omega}{p_1 p_2 (\Delta_2 + n' n_2) (\Delta_1 - nn_1)}, \quad I_4^{(x)} = \int \frac{\Phi_{III II}^{(x)} d\Omega' d\Omega}{p_1 p_2 (\Delta_1 - n' n_1) (\Delta_2 + nn_2)},$$

где

$$\Phi_{ab}^{(x)}(n', n) = \sum_{v_1', v_2'} \sum_{v_1, v_2} \beta_{jm}^{*x} \beta_{jm}^{(x)} (\Gamma_a^{(1)})_{nv_1}^{n' v_1'} (\Gamma_b^{(2)})_{-nv_2}^{-n' v_2'}. \quad (19)$$

$$(a, b = I, II, III, IV).$$

В этой формуле:

$$\begin{aligned} \Gamma_I^{(i)} &= \gamma_4 (A_i \hat{k}^{(i)} + B_i) \Lambda_i (A_i \hat{k}^{(i)} + B_i), \\ \Gamma_{II}^{(i)} &= \gamma_4 (A_i \hat{k}^{(i)} + B_i) \Lambda_i \gamma_5, \\ \Gamma_{III}^{(i)} &= \gamma_4 \bar{\gamma}_5 \Lambda_i (A_i \hat{k}^{(i)} + B_i), \\ \Gamma_{IV}^{(i)} &= \gamma_4 \bar{\gamma}_5 \Lambda_i \gamma_5 \end{aligned} \quad (20)$$

и

$$\Lambda_i = \frac{\hat{p}_i + M}{2M}. \quad (21)$$

Выражение (17) надо усреднить по четырем возможным независимым состояниям начальных частиц. Для этого найдем суммы

$$\sum_{(x)} \Phi_{ab}^{(x)} = \sum_{v'_1, v'_2} \sum_{v_1, v_2} (\Gamma_a^{(1)})_{nv_1}^{n'v'_1} (\Gamma_b^{(2)})_{-nv_2}^{-n'v'_2} \left\{ \frac{2v'_1}{V^2} \delta_{v'_1, -v'_2} \frac{2v_1}{V^2} \delta_{v_1, -v_2} Y_{jm}^{*'} Y_{jm} + \right. \\ \left. + \left[\delta_{v'_1 v'_2} + \frac{\delta_{v'_1 - v'_2}}{V^2} \right] \left[\delta_{v_1 v_2} + \frac{\delta_{v_1 - v_2}}{V^2} \right] \sum_{\lambda=-1}^1 (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v'}^{*'} (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v} \right\} \quad (22) \\ (v = v_1 + v_2; v' = v'_1 + v'_2).$$

Правая часть (22) содержит комбинации матричных элементов операторов для различных «спиновых» состояний (опущены для краткости угловые переменные, от которых зависят шаровые функции и векторы). Для вычисления матричных элементов проще всего представить четырехкомпонентные спинорные амплитуды для всех четырех возможных состояний дираковской частицы в виде четырехрядной квадратной матрицы $B_{\rho\mu} = b_{\rho}^{\mu}$ ($\mu = 1, 2, 3, 4$), причем $\mu = 1, 2$ соответствуют состоянию с положительной энергией, а $\mu = 3, 4$ — состоянию с отрицательной энергией. Указанная матрица в нашем случае есть

$$B(p, \pm \mathbf{n}) = \sqrt{p(E+M)/2} \left(\rho_1 \mp \frac{p}{E+M} \rho_3 \vec{\sigma} \mathbf{n} \right) \quad (23)$$

(нормировка по шкале энергии).

Нетрудно видеть, что при конкретном вычислении матричных элементов можно представить их в виде:

$$\{B^+(\mathbf{n}') \Gamma_a B(\mathbf{n})\}_{\rho\sigma} = U_a(\mathbf{n}', \mathbf{n}) + \vec{\sigma}_{\rho\sigma} \mathbf{R}_a(\mathbf{n}', \mathbf{n}); \quad (24)$$

$$\{B^+(-\mathbf{n}') \Gamma_b B(-\mathbf{n})\}_{\rho\sigma} = V_b(\mathbf{n}', \mathbf{n}) + \vec{\sigma}_{\rho\sigma} \mathbf{S}_b(\mathbf{n}', \mathbf{n}), \quad (25)$$

где U и V — скаляры, а $\mathbf{R}$ и $\mathbf{S}$ — векторы. Действительно, нас интересуют только элементы, составляющие левый верхний угол матриц левой части (24) и (25) (энергия положительна). Производя перемножение матриц, легко заметить, что вклад в искомое выражение дают только члены, содержащие единичную матрицу и матрицы $\vec{\sigma}$. Члены, содержащие множителями матрицы ρ_1 и ρ_2 , можно отбросить, так как они дают матрицы с пустым левым верхним углом, матрица ρ_3 может быть заменена единицей. В результате для (22) имеем

$$\sum_{(x)} \Phi^{(x)} = (UV - \mathbf{RS}) Y_{jm}^{*'}(\vartheta', \varphi') Y_{jm}(\vartheta, \varphi) + \\ + \sum_{\lambda=-1}^1 \left\{ (UV + \mathbf{RS}) (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v'}^{*'} (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v} - i[US + V\mathbf{R}, (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v'}^{*'} (Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v}] - \right. \\ \left. - (\mathbf{R}, Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v'}^{*'} (\mathbf{S}, Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v} - (\mathbf{S}, Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v'}^{*'} (\mathbf{R}, Y_{jm}^{(\lambda)})_{-v} \right\}. \quad (26)$$

Для каждого конкретного значения $a, b = \text{I, II, III, IV}$ надо подставить соответствующие величины $U, V, \mathbf{R}, \mathbf{S}$.

В интегралах (18) играет роль только та область изменения угловых переменных, в которой множители в знаменателях имеют минимальное значение, поскольку сферические функции являются быстро осциллирующими (мы рассматриваем, вообще говоря, большие значения момента j).

От направлений интегрирования зависят также функции $U, V, \mathbf{R}, \mathbf{S}$. Однако в хорошем приближении их можно вынести (как сравнительно медленно меняющиеся) из-под знака интеграла при тех значениях

$\mathbf{n}'$ и $\mathbf{n}$, когда множители в знаменателях имеют наименьшее значение. Ясно, что интегралы существенно отличны от нуля только при больших энергиях E и E_i ($i=1,2$), когда параметры Δ_i близки к единице. Непосредственно вычисляя, получаем для членов (I, IV):

$$\frac{1}{4M} \frac{\varepsilon}{p^2} U_I = |T_1 - T^1|^2 \{2(kp_1)[E_k(1 + \varepsilon^2) + 2\varepsilon \mathbf{k}\mathbf{n}_2] -$$

$$- \mu^2 \frac{p_1}{\varepsilon_1} (\varepsilon_1^2 + 2\varepsilon \varepsilon_1 \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 + \varepsilon^2)\}, \quad (27)$$

$$4M \frac{\varepsilon}{p^2} V_{IV} = p_2 \frac{(\varepsilon - \varepsilon_2)^2}{\varepsilon_2}, \quad (28)$$

$$R_I = S_{IV} = 0, \quad (29)$$

где $\varepsilon = p/(E + M)$, $\varepsilon^2 = (E - M)/(E + M)$ и аналогично для ε_i ($i=1,2$). При вычислении учитывался только тот член в (11), который, как было указано, дает наибольший эффект. Вторым членом в (27) можно пренебречь, поскольку он одного порядка с первым только при $E_k \sim \mu$, что при больших начальных энергиях нуклонов маловероятно. Такое же выражение, но с переменной индексов, имеет место для членов (IV, I).

Переходя далее к I_3 и I_4 , получим после ряда преобразований

$$U_{II} = V_{III} = 0, \quad (30)$$

$$4M \frac{\varepsilon}{p^2} R_{II} = \frac{p_1}{\varepsilon_1} (\varepsilon - \varepsilon_1) (a_1 \mathbf{n}_1 - b_1 \mathbf{n}_2), \quad (31)$$

$$4M \frac{\varepsilon}{p^2} S_{III} = \frac{p_2}{\varepsilon_2} (\varepsilon - \varepsilon_2) (a_2 \mathbf{n}_2 - b_2 \mathbf{n}_1), \quad (32)$$

где

$$a_1 = E_k - \varepsilon p_2 + \varepsilon_1 p_1, \quad b_1 = \varepsilon \varepsilon_1 E_k - \varepsilon_1 p_2 + \varepsilon p_1,$$

$$a_2 = E_k - \varepsilon p_1 + \varepsilon_2 p_2, \quad b_2 = \varepsilon \varepsilon_2 E_k - \varepsilon_2 p_1 + \varepsilon p_2. \quad (33)$$

Двойные интегралы в (18) расщепляются в указанном выше приближении на произведения интегралов типа

$$\int \frac{Y_{jm}(\vartheta, \varphi) d\Omega}{(\Delta_i \mp n n_i)} = 4\pi (\pm 1)^j Q_j(\Delta_i) Y_{jm}(\vartheta_i, \varphi_i), \quad (34)$$

где Q_j — функция Лежандра второго рода. Этот интеграл без труда вычисляется, если воспользоваться известным из теории сферических функций разложением:

$$\frac{1}{\Delta_i \mp \cos \gamma_i} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) P_n(\pm \cos \gamma_i) Q_n(\Delta_i), \quad (35)$$

где P_n — полином Лежандра. Подставляя это разложение в интеграл и используя теорему сложения для полиномов Лежандра, а также ортогональность сферических функций, находим (34).

В результате имеем

$$\frac{1}{4} \sum_{(x)} I_1^{(x)} = (4\pi)^2 |T_1 - T^1|^2 \left(\frac{p^2}{\varepsilon}\right)^2 \frac{(\varepsilon - \varepsilon_2)^2}{\varepsilon_2} \cdot \frac{2(kp_1)}{p_2} [E_k(1 + \varepsilon^2) + 2\varepsilon \mathbf{k}\mathbf{n}_2] \times$$

$$\times \frac{1}{4} \left[Q_j^2(\Delta_2) |Y_{jm}|^2 + \sum_{\lambda=-1}^1 Q_{j+\lambda}^2(\Delta_2) (Y_{jm}^{*(\lambda)}, Y_{jm}^{(\lambda)}) \right], \quad (36)$$

где для простоты опущены аргументы ϑ_2, φ_2 . Далее, поскольку

$$\sum_{m=-j}^j Y_{jm}^* Y_{jm} = \sum_{m=-j}^j (Y_{jm}^{*(\lambda)}, Y_{jm}^{(\lambda)}) = \frac{2j+1}{4\pi}, \quad (37)$$

мы можем написать для искомой величины F следующее выражение:

$$F = 4\pi \left(\frac{2\pi}{\mu^2} \right)^3 G_1 \left(\frac{p}{\varepsilon} \right)^2 \frac{(\varepsilon - \varepsilon_2)^2 (kp_1)}{\varepsilon_2 p_2} [E_k (1 + \varepsilon^2) + 2 \varepsilon k n_2] \times \\ \times \frac{1}{4} \left[Q_j^2(\Delta_2) + \sum_{\lambda=-1}^1 Q_{j+\lambda}^2(\Delta_2) \right] + (1 \longleftrightarrow 2), \quad (38)$$

где G_1 есть квадрат «зарядового» матричного элемента, просуммированный по зарядовым состояниям конечных нуклонов:

$$G_i = \sum_{t_1, t_2} |T_i - T^i|^2 \quad (i = 1, 2). \quad (39)$$

Написанный явно в (38) член соответствует испусканию мезона первым нуклоном. Как видно отсюда, определяющая зависимость от углового момента функция Q_j имеет аргументом выражение Δ_2 , зависящее от энергии конечного состояния второго, не испустившего реального мезона нуклона. В представляющем интерес случае $E, E_2 \gg M$ выражение Δ_2 с точностью до членов порядка $(M/E)^2$ можно записать

$$\Delta_2 - 1 = \frac{\mu^2}{2EE_2} + \frac{M^2}{2} \left(\frac{1}{E_2} - \frac{1}{E} \right)^2. \quad (40)$$

Очевидно, что существенная область изменения E_2 определяется условием $\frac{\mu^2}{EE_2} \sim M^2 \left(\frac{1}{E_2} - \frac{1}{E} \right)^2$, т. е., иными словами, второй, не испустивший мезона нуклон должен обладать энергией, большей $(1 - \mu/M)E$, где E — начальная энергия нуклона. Остальная энергия распределяется между первым нуклоном и мезоном.

Нетрудно показать, что «интерференционные» члены $I_3^{(x)}$ и $I_4^{(x)}$ в интересующем нас случае малы по сравнению с $I_1^{(x)}$ и $I_2^{(x)}$. Вычисляя, находим для $\sum_{(x)} I_3^{(x)}$

$$\left(\frac{\pi}{M} \right)^3 (-1)^j \left(\frac{p^2}{\varepsilon} \right)^2 \frac{\varepsilon - \varepsilon_1}{\varepsilon_1} \frac{\varepsilon - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} Q_j(\Delta_1) Q_j(\Delta_2) \frac{P_{j-1} - P_{j+1}}{2j+1} (a_1 - b_1)(a_2 - b_2), \\ a_i - b_i = E_k (1 - \varepsilon \varepsilon_i) - (\varepsilon - \varepsilon_i)(p_1 + p_2),$$

где $i = 1, 2$. При больших энергиях $E \gg M$ этим выражением можно пренебречь. Кроме того, при $j \gg 1$ имеет место неравенство

$$|P_j - P_{j+2}| \leq C_0 \sqrt{1/\pi j},$$

где C_0 — постоянная, не зависящая от j . Таким образом I_3 при больших j оказывается порядка $j^{-3/2}$ по сравнению с I_1 и I_2 . Заметим, что при вычислении при помощи плоских волн эти члены также не дают вклада вследствие равенства нулю следа матриц.

3. Для того чтобы выразить вероятность как функцию только энергии образующегося мезона, надо проинтегрировать полученное выражение (38) по состояниям конечных нуклонов. Нетрудно показать [7], исходя из (2), что полная вероятность выражается формулой

$$W_j = \frac{M^2}{2(2\pi)^5 N} \int_{\mu}^{E_h^{\text{макс}}} dE_h \int_{\pi}^0 d(\cos \vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ \times \int_{E_2^{\text{мин}}(E_h)}^{E_2^{\text{макс}}(E_h)} dE_2 \int_{\pi}^0 d(\cos \alpha) \delta(\cos \alpha - A) \int_0^{2\pi} d\beta F. \quad (41)$$

Здесь

$$A = \frac{4E(E - E_h) - 2E_2(2E - E_h) + \mu^2}{2p_2 k}, \quad (42)$$

$$E_2^{\text{макс}}(E_h) = E - \frac{E_h}{2} \pm \frac{k}{2} \sqrt{\frac{E(E_h^{\text{макс}} - E_h)}{E(E_h^{\text{макс}} - E_h) + M^2}}, \quad (43)$$

$$E_h^{\text{макс}} = E - \frac{M^2}{E} + \frac{\mu^2}{4E}, \quad (44)$$

причем ϑ и φ — угловые координаты импульса мезона; α и β — угловые координаты импульса нуклона (в данном случае второго, координаты первого исключаются интегрированием с четырехмерной δ -функцией) в системе, где осью z служит направление вектора импульса мезона; $E_h^{\text{макс}}$ — максимальное значение энергии мезона. Нетрудно проверить справедливость этой формулы на основе элементарных соображений. Векторы импульсов частиц конечного состояния в системе координат, где покоится центр инерции, образуют треугольник. Тогда косинус угла между импульсами мезона и нуклона есть A . Из условия $\cos \alpha \leq 1$ находим предельные значения энергии нуклона $E_2^{\text{макс}}(E_h)$ при данной величине энергии мезона, даваемые формулой (43).

После интегрирования по углам находим выражение для дифференциальной вероятности:

$$dW_j = 4\pi \left(\frac{M^2}{\mu^3}\right)^2 \frac{G_1}{N} 2E(E - E_h) \int_{E_2^{\text{мин}}(E_h)}^{E_2^{\text{макс}}(E_h)} \left(\frac{E - E_2}{E_2}\right)^4 \left\{ Q_j^2(\Delta_2) + \right. \\ \left. + \sum_{\lambda=-1}^1 Q_{j+\lambda}^2(\Delta_2) \right\} dE_2 + (1 \leftrightarrow 2). \quad (45)$$

4. Получим теперь асимптотическое выражение при $j \gg 1$ функций Лежандра второго рода, входящих в формулу (45).

Имеем

$$Q_j(\Delta_i) = Q_j\left(1 + \frac{x_i^2}{2}\right) \quad (i = 1, 2), \quad \text{где } x_i = \left[\frac{\mu^2}{EE_i} + \left(\frac{M}{E_i} - \frac{M}{E} \right)^2 \right]^{1/2} (x_i \ll 1). \quad (46)$$

Воспользуемся интегральным представлением функции $Q_n(z)$ [8]

$$Q_n(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(t)}{z - t} dt, \quad (47)$$

что в нашем случае переходит в

$$Q_n\left(1 + \frac{x^2}{2}\right) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(t) dt}{1 - t + (x^2/2)} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \frac{P_n(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta}{1 - \cos \vartheta + (x^2/2)}. \quad (48)$$

В этом интеграле роль играют только малые углы $\vartheta \ll 1$, когда $\cos \vartheta \sim 1$. При этом для полиномов Лежандра мы можем воспользоваться асимптотическим выражением через функцию Бесселя нулевого порядка:

$$Q_n(1 + \frac{x^2}{2}) \approx \frac{1}{2} \int_1^\pi \frac{J_0(n\vartheta) \vartheta d\vartheta}{(\vartheta^2/2) + (x^2/2)} = \int_0^{n\pi} \frac{J_0(\xi) \xi d\xi}{\xi^2 + (nx)^2}. \quad (49)$$

Считая n достаточно большим, заменяем верхний предел бесконечностью и тогда получаем

$$Q_n(1 + \frac{x^2}{2}) \approx \int_0^\infty \frac{J_0(\xi) \xi d\xi}{(nx)^2 + \xi^2} = K_0(nx), \quad (50)$$

где $K_0(z) = \frac{\pi i}{2} H_0^{(1)}(iz)$ — так называемая модернизированная функция Ганкеля нулевого порядка.

Таким образом выражение (45) может быть переписано в виде:

$$\frac{dW_j}{dE_k} = 2\pi \left(\frac{4M^2}{\mu^3} \right)^2 \frac{G}{N} E(E - E_k) \int_{E_l^{\min}(E_k)}^{E_l^{\max}(E_k)} \left(\frac{E - E_l}{E_l} \right)^4 K_0^2(jx_l) dE_l, \quad (51)$$

где $G = G_1 + G_2$, а x_l определяется формулой (46).

Определенный интеграл (51) в явном виде не берется. Рассмотрим случай $(\mu/E)j \gg 1$ и используем асимптотическое представление функции $K_0(z)$, тогда имеем

$$\frac{dW_j}{dE_k} = \frac{\pi^2}{j} \left(\frac{4M^2}{\mu^3} \right)^2 \frac{G}{N} E(E - E_k) I, \quad (52)$$

$$I = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{\xi^4 d\xi}{(E + \xi)^4} \frac{\exp[-2jL]}{L}, \quad (53)$$

где

$$L = \left[\frac{\mu^2}{E(E + \xi)} + \frac{M^2}{E^2} \left(\frac{\xi}{E + \xi} \right)^2 \right]^{1/2},$$

и $\xi = E - E_l$. При $(\mu/E)j \gg 1$ можно считать, что ξ при своем изменении определяется условием $(M\xi/\mu E) \ll 1$. В противном случае вероятность благодаря большому множителю в показателе экспоненты резко уменьшается. Поэтому пренебрегаем ξ по сравнению с E в знаменателе, а показатель экспоненты разлагаем в ряд. Далее, из рассмотрения пределов интегрирования (43) нетрудно видеть, что существенный вклад в вероятность дадут лишь такие энергии мезона, когда $E_k \gg \mu$, $E(E_k^{\max} - E_k) \gg M^2$. Поэтому можно написать

$$I \approx \frac{\exp\{-(2\mu/E)j\}}{\mu E^3} \int_0^{E_k} \xi^4 \exp\left\{-\frac{M^4}{\mu E^3} j \xi^2\right\} d\xi. \quad (54)$$

Этот интеграл сводится к интегралу Пуассона, так что, если учесть только наибольшие члены, получим

$$I \approx \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \left(\frac{E}{j\mu} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu E}{M} \right)^5 \Phi \left[\sqrt{\frac{j\mu}{E}} \frac{M}{\mu} \frac{E_k}{E} \right] \frac{\exp\{-(2\mu/E)j\}}{\mu E^3}, \quad (55)$$

где Φ — интеграл вероятности. Таким образом для вероятности на единичный интеграл энергии мезона получаем формулу

$$\frac{dW_j}{dE_h} = \frac{3(4\pi)^{3/2}}{\mu} \sqrt{2G} \frac{\exp\{-(2\mu/E)j\}}{(2\mu j/E)^{3/2}} \left(\frac{E}{M}\right) \left(1 - \frac{E_h}{E}\right) \Phi \left[\sqrt{\frac{\mu}{E} j} \frac{M}{\mu} \frac{E_h}{E} \right]. \quad (56)$$

Для полной вероятности имеем

$$W_j = 3(2\pi)^{3/2} \left(\frac{2M}{\mu}\right) G \left(\frac{E}{M}\right)^2 \frac{\exp\{-(2\mu/E)j\}}{(2\mu j/E)^{3/2}}. \quad (57)$$

Эта формула определяет вероятность образования мезона при больших значениях углового момента сталкивающихся частиц.

5. Множитель G может быть вычислен согласно обычным правилам:

	$N-P$	$P-P$
$\pi(+), \pi(-)$	$2f^2(f^4 + 4f_3^4)$	$2f^2(f^4 + 4f_3^4)$
$\pi^0(3)$	$4f_3^2 f^4$	0
$\pi^0(4)$	0	0

Здесь принято $f_1 = f_2 = f/\sqrt{2}$. Как видно, таблица дает нуль для случая образования нейтрального мезона в нейтральной теории (связанного посредством единичной матрицы τ_4). Кроме того, нулю равна вероятность образования нейтральных мезонов $\pi^0(3)$ (связанных посредством матрицы τ_3) для столкновения протона с протоном. Нули возникают благодаря сокращению двух матричных элементов, соответствующих испусканию реального мезона до и после обмена виртуальным. При этом учитывается только наибольший член.

6. Найдем то значение параметра $\xi = (2\mu/E)j$, при котором вероятность оказывается при данной энергии порядка единицы. Если обозначить все численные коэффициенты через α и перейти к лабораторной системе координат, то для определения нужного значения ξ_k получаем трансцендентное уравнение

$$\xi_k + \frac{7}{2} \ln \xi_k = \ln \alpha \frac{E_{\text{лаб}}}{2M}, \quad (58)$$

где $E_{\text{лаб}}$ — энергия падающей частицы.

Это уравнение решается графически; соответствующий график приведен на рис. 2.

Поскольку вероятность образования мезона для столкновений с прицельным параметром, большим «критического», падает экспоненциально, можно не учитывать вклада этих столкновений и написать для полного эффективного сечения формулу (в лабораторной системе координат)

$$\sigma = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\xi_k}{\mu}\right)^2 \approx 1,4 \xi_k^2 \cdot 10^{-26} \text{ см}^2. \quad (59)$$

Величина ξ_k дается уравнением (58). Таким образом при очень больших энергиях ($\sim 10^3 M$) полное эффективное сечение должно расти, как квадрат логарифма энергии. При меньших энергиях зависимость сечения от энергии определяется из графика (рис. 3). Конечно, формула (59) является только грубо приближенной, так как, не умея в рамках теории возмущений оперировать со столкновениями больших энергий и малых прицельных параметров, мы вынуждены сделать произвольные предположения о ходе кривой $W = W(j)$ при $j\mu/E < \xi_k$.

Если принять $G \sim (0,145)^3$, что следует из сравнения предсказаний теории с экспериментом при малых энергиях [2], то величина $\alpha = A/2$ оказывается порядка единицы.

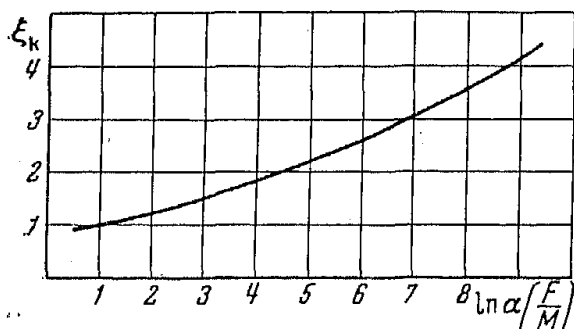
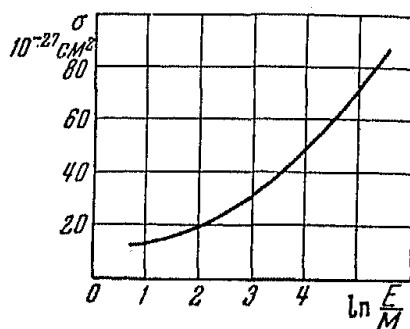
Рис. 2. $\alpha = 3,1 \cdot 10^2 \alpha$ 

Рис. 3

Мы не рассматриваем здесь углового распределения образующихся мезонов. Поскольку начальная волновая функция задается в виде шаровой волны, мы не можем говорить об определенном направлении импульса начальных частиц.

Если, однако, рассмотреть случай больших j , то, полагая $m = 0$, можно показать, что угловая зависимость определяется квадратом полинома Лежандра $P_j^2(\cos \theta)$. Направление падающих частиц также определяется полиномом Лежандра того же порядка.

Таким образом распределение мезонов при больших j будет резко неизотропным в системе центра инерции (два конуса в лабораторной системе), что подтверждает указанную выше интерпретацию экспериментальных данных.

Выводы

Сделана попытка рассмотреть методами теории возмущений процесс образования мезонов при касательных столкновениях нуклонов как маловероятный независимо от величины постоянной связи. Вклад столкновений частиц, обладающих большим относительным угловым моментом, оказывается экспоненциально малым. Взаимодействие нуклонов не приводит к передаче значительного импульса, так что нуклон, не «испустивший» реального мезона, почти сохраняет свою первоначальную энергию.

Согласно этим результатам, сечение обрывается на некотором критическом параметре столкновения, медленно (логарифмически при крайне больших энергиях) меняющемся с ростом начальной энергии, что позволяет по порядку величины оценить эффективное сечение процесса. Можно предположить, что обращение в нуль вероятности образования нейтральных мезонов при столкновении протон — протон свидетельствует о недостаточности рассмотрения только первого исчезающего приближения. Действительно, запрет, как известно, имеющий место для этой реакции при малых энергиях, должен сниматься при больших энергиях, на что имеются экспериментальные указания.

В заключение приношу искреннюю благодарность Л. Д. Ландау за предложение темы и постоянное внимание к работе, а также Е. М. Лифшицу за ряд полезных советов.

Литература

- [1] А. М. Балдин и В. В. Михайлов. Усп. физ. наук, **44**, 200, 1951; В. П. Силин и В. Я. Файнберг. Усп. физ. наук, **50**, 305, 1953.—[2] K. Bruesckner. Phys. Rev., **82**, 598, 1951.—[3] J. J. Lord, J. Fainberg a. M. Schein. Phys. Rev., **80**, 970, 1950; U. Camerini, P. H. Fowler, W. O. Lock a. H. Muirhead. Phil. Mag., **41**, 413, 1950; M. Teuchner. Naturwiss., **39**, 68, 1952.—[4] W. Heisenberg. Naturwiss., **39**, 68, 1952.—[5] В. Т. Хозяинов. ЖЭТФ, **27**, 275, 1954.—[6] K. M. Case. Phys. Rev., **76**, 1, 1949.—[7] Cécile Morette. Phys. Rev., **76**, 1432, 1949.—[8] Е. В. Гобсон. Теория сферических и эллипсоидальных функций, ИИЛ, 1952, стр. 65.
-

СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ ОКРАШЕННЫХ РАССЕИВАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ. I

З. В. Жидкова

Экспериментально установлено, что для слабопоглощающих веществ в диспергированном состоянии (например, порошков цветных стекол) абсолютное значение коэффициента диффузного отражения R увеличивается при уменьшении размеров частиц и увеличении относительного коэффициента преломления n_0 вещества частиц и связующей среды; ход кривых $-\lg R(\lambda)$ воспроизводит ход кривых поглощения $K(\lambda)$ для вещества частиц в массивном состоянии только в общих чертах, причем соответствие кривых тем лучше, чем выше дисперсность порошка и чем больше значение n_0 . В случае большого значения показателя поглощения вещества κ («металлическое» отражение) между кривыми $-\lg R(\lambda)$ и $K(\lambda)$ указанного соответствия нет.

Введение

Спектрофотометрический метод исследования и анализа веществ по светопоглощению, получивший широкое распространение, в настоящее время разработан сравнительно хорошо лишь для прозрачных сред.

Не меньшее значение приобретает применение спектрального метода к изучению непрозрачных, диффузно рассеивающих сред, к которым относится огромное многообразие окружающих нас природных и промышленных объектов: горные породы и растительные покровы, ткани, бумага, лакокрасочные покрытия и многие другие. Эта область исследований находится, однако, в самой начальной стадии развития, что отчасти обусловлено сложностью явления прохождения света в диффузно рассеивающих средах и, следовательно, методики его изучения.

Действительно диффузное отражение и пропускание рассеивающей среды с поглощающими частицами вещества зависит не только от поглощательной способности вещества частиц, но и от особенностей прохождения света в среде. Последние связаны с тем, что отдельные лучи пучка света, падающего на светорассеивающий слой, ввиду многократности отражений, которые они претерпевают, проходят в его толще самые различные пути (а не одинаковые, как в прозрачных средах), по-разному поглощаются и выходят наружу по-разному ослабленными (рис. 1).

Таким образом, диффузно рассеянный поток света состоит из суммы отдельных элементарных потоков:

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \dots, \quad (1)$$

распределение энергии между которыми зависит от степени дисперсности вещества (размеров частиц l), от формы частиц, показателей

преломления основного вещества и связующей среды¹, толщины слоя, углов падения и наблюдения и т. д.

Естественно предполагать, что спектры диффузного отражения веществ, находящихся в мелкодисперсном состоянии, должны быть похожи на спектры пропускания тех же веществ в массивном состоянии, так как и те, и другие спектры связаны с поглощением света в элементарных частицах данного вещества. Однако они не будут полностью совпадать, так как истинный спектр пропускания вещества в массивном состоянии после превращения его в порошок искажен рассеянием света на частичках. Точное выяснение вносимых искажений имеет большое значение в тех задачах, целью которых является изучение спектров истинного поглощения вещества².

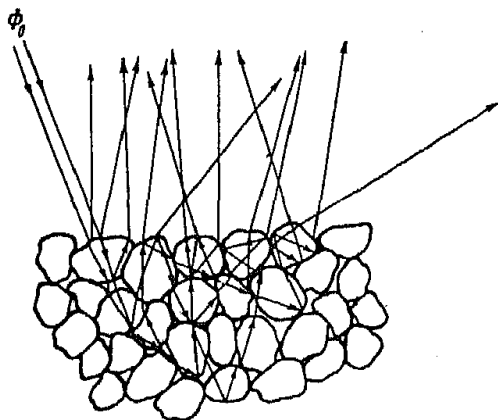


Рис. 1. Рассеяние света в порошке

Необходимость установления связи между спектрами диффузного отражения и пропускания отмечалась давно. Однако до последнего времени мы имеем лишь отдельные частные и неполные решения [3, 8, 9] задачи. Для возможности общего и более полного решения необходимо систематическое изучение влияния отдельных факторов, определяющих прохождение лучей в светорассеивающем слое.

В данной работе рассматривается простейший случай равномерно окрашенных частиц в бесконечно толстом слое, т. е. когда имеет место только диффузное отражение. Мы поставили своей целью изучение а) влияния на спектр диффузного отражения слоя двух факторов: степени дисперсности и величины относительного показателя преломления вещества частиц и связующей среды, и б) влияния этих же факторов и величины показателя поглощения κ на связь между спектрами диффузного отражения слоя и истинным поглощением вещества частиц.

При исследовании спектров диффузного отражения диспергированного вещества обычно измеряют коэффициент отражения:

$$R(\lambda) = \frac{\Phi(\lambda)}{\Phi_0(\lambda)}, \quad (2)$$

где $\Phi_0(\lambda)$ обозначает поток падающего света, а $\Phi(\lambda)$ — отраженного. Иногда для характеристики спектра отражения применяют величину $-\lg R(\lambda)$, которую можно назвать условной оптической плотностью при отражении.

При выяснении связи между спектром диффузного отражения вещества, находящегося в мелкодисперсной фазе, со спектром истинного поглощения того же вещества в массивном состоянии сопоставляются зависимости $-\lg R(\lambda)$ и $K(\lambda)$, где $K(\lambda)$ — коэффициент поглощения вещества частицы.

¹ Связующей средой мы называем среду, находящуюся между частицами основного вещества.

² Можно указать на применение метода диффузного отражения к анализу порошкообразных веществ в видимой [1] и инфракрасной [2] областях спектра, при определении квантового выхода люминесценции [3, 4], а также в области адсорбционных явлений [5-7].

Методика эксперимента

В качестве объектов исследования были выбраны вещества, по возможности сильно различающиеся по показателям преломления, обладающие селективным поглощением и химической устойчивостью. Наиболее подходящим материалом оказались молекулярно окрашенные стекла: СЗС-8, ПС-5 и ЖЗС-1, для которых легко может быть определен $K(\lambda)$ ($\kappa_{\lambda} \sim 3 \cdot 10^{-5}$), и красители: фуксин и кристаллический фиолетовый (показатель поглощения для фуксина равен $\sim 1,35$ [10]). Кроме того, были испытаны пигменты: карбид кремния и кобальтовый синий; последний в отношении κ занимает промежуточное положение между стеклами и красителями. Стекло ПС-5 было сварено специально и несколько отличается от стекла ПС-5 по каталогу [11]: при варке в него было добавлено 0,18% кобальта. Карбид кремния (пигмент с очень высоким показателем преломления) удовлетворял требованию ГОСТ [12].

Дробление стекла производилось в фарфоровой шаровой мельнице. Частицы размером 1—2 μ были получены путем отмучивания с подсчетом времени осаждения частиц данного размера по закону Стокса. Частицы больших размеров выделялись при помощи калиброванных сит с отверстиями в интервалах 44—53, 105—125, 210—250 и 1000—1190 μ .

При дроблении частицы получались неправильной формы. Мелкие частицы (до 210—250 μ) по своей форме более или менее близки к шарикам, тогда как крупные (1000—1190 μ) имели вид пластинок, толщина которых иногда была в 2—3 раза меньше других размеров. Так как при помощи калиброванных сит, естественно, фиксируется только один из трех размеров таких частиц, а именно, ширина, то данные $l = 1000 - 1190 \mu$; $l = 210 - 250 \mu$ и т. д., указанные для каждой кривой (см. ниже), относятся, строго говоря, лишь к ширине пластинок частиц. Для получения воспроизводимых измерений порошок в кювете слегка утрамбовывался при помощи матированного стеклянного пестика. Частицы-пластинки располагаются при этом параллельно дну кюветы; следовательно, путь, который проходит свет в каждой отдельной частице, равен ее толщине, т. е. заведомо отличается от l . Отличие будет наибольшим для крупных частиц; это обстоятельство необходимо учитывать при интерпретации результатов.

В качестве связующих сред были выбраны воздух и жидкости, мало испаряющиеся, не поглощающие в исследуемой области спектра и обладающие различными показателями преломления: α -бромнафталин³, анисовое масло, октоиль (вакуумное масло), глицерин, вода.

На рис. 2 показана зависимость показателей преломления для различных применяемых веществ и жидкостей (связующих сред) от длины волны.

Измерение коэффициентов диффузного отражения $R(\lambda)$ производилось на фотоэлектрическом спектрофотометре Бекмана при помощи специальной насадки [13]. Образцом сравнения служил порошок окиси магния. Из литературы известно [14], что для бесконечно толстого слоя коэффициент отражения MgO в видимой области составляет $\sim 95\%$, причем в интервале $\lambda = 500 - 800 m\mu$ он почти не зависит от длины волны. Во всех приведенных ниже окончательных результатах дан абсолютный коэффициент отражения.

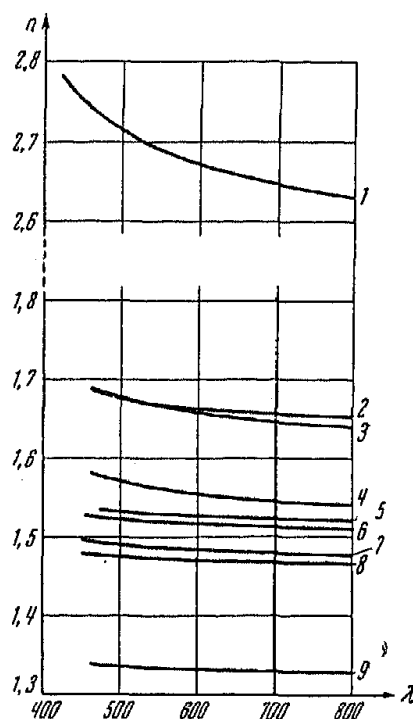
Исследуемый образец и образец сравнения находились в кюветах (металлических чашечках) глубиной от 5 до 30 мм. Выбор кюветы той или другой глубины определялся условием получения «бесконечно толстого» слоя; отсутствие пропускания слоя контролировалось путем измерения $T(\lambda)$ испытуемого порошка в обычной плоскопараллельной

³ α -бромнафталин был предварительно очищен от окрашивающих примесей.

стеклянной кювете при различных толщинах. Соблюдение вышеуказанного условия необходимо, так как абсолютная величина $R(\lambda)$ и его спектральный ход для порошков (как окрашенных, так и неокрашенных), при прочих равных условиях, зависит от толщины исследуемого слоя.

При изучении влияния связующей среды на спектральный ход отражения от порошков жидкость наливалась в кювету с порошком в таком количестве, чтобы она заполняла все промежутки между частицами порошка и покрывала его поверхность тонким слоем. Толщина этого слоя могла быть любой, так как применяемые жидкости в исследуемой области были бесцветны. Наличие такого слоя вводило при изме-

Рис. 2. Зависимость показателя преломления от длины волны. Кривые дисперсии: 1 — карбид кремния, 2 — стекло ПС-5, 3 — α -бромнафталин, 4 — анисовое масло, 5 — стекло ЖЗС-1, 6 — стекло СЗС-8, 7 — октоиль, 8 — глицерин, 9 — вода



рении $R(\lambda)$ некоторую систематическую ошибку $\Delta R \approx -0,02$. Ее можно было бы устранить, применяя в качестве образца сравнения слой окиси магния, покрытый слоем той же самой связующей среды. Однако при этом значения коэффициентов отражения, полученные для различных связующих сред, были бы не сопоставимыми друг с другом. Поэтому этот способ не применялся.

Результаты и их обсуждение

1. Зависимость спектров диффузного отражения порошков от степени дисперсности. На рис. 3 приведены кривые зависимости коэффициента диффузного отражения R от длины волны для порошков цветного стекла ЖЗС-1 различных степеней дисперсности: 1 — 1—2, 44—53, 105—125, 210—250 и 1000—1190 μ . Из рисунка видно, что значение абсолютной величины R возрастает по мере уменьшения размеров частиц.

Рассмотрение всех данных для цветных стекол показывает, что для веществ с малым значением x справедливо следующее. Если размеры частиц очень малы (1—2 μ), то коэффициент отражения мало зависит от длины волны, а по абсолютному значению близок к единице. При высокой степени дисперсности порошки даже таких веществ, которые в массивном состоянии имеют сильную окраску, приближаются по своей отражательной способности к белым. Это объясняется тем, что при небольших размерах частиц свет испытывает очень сильное диффузное отражение уже в верхней части слоя порошка; поток выходит наружу, пройдя через очень малые частицы, и ослабляется незначительно.

Если размеры частиц очень велики (порядка 1000 μ), то коэффициент диффузного отражения сильно зависит от длины волны, и светорассеивающий слой обладает насыщенной цветовой характеристикой. Для некоторых длин волн (поглощающихся более сильно) коэффициент отражения падает до $\sim 4\%$; это означает, что отражение

происходит только от наружной поверхности частиц верхнего слоя. Свет, проникший внутрь слоя, полностью поглощается уже в первых больших частицах окрашенного вещества.

Кривые — $\lg R(\lambda)$ для порошка стекла ПС-5 различных степеней

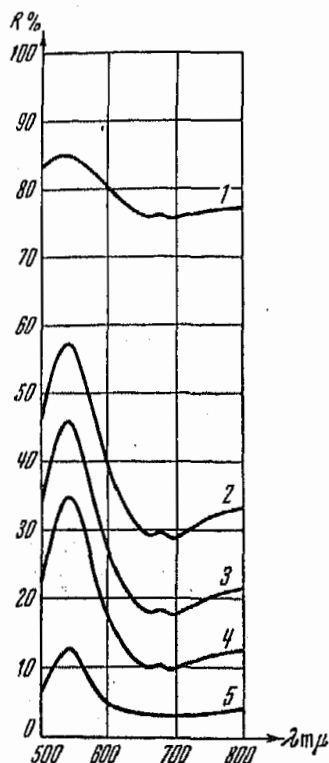


Рис. 3. Влияние степени дисперсности на спектральный ход коэффициента диффузного отражения от порошка стекла ЖЗС-1. 1 — $l = 1 - 2 \mu$, 2 — $l = 44 - 53 \mu$, 3 — $l = 105 - 125 \mu$, 4 — $l = 210 - 250 \mu$, 5 — $l = 1000 - 1190 \mu$.

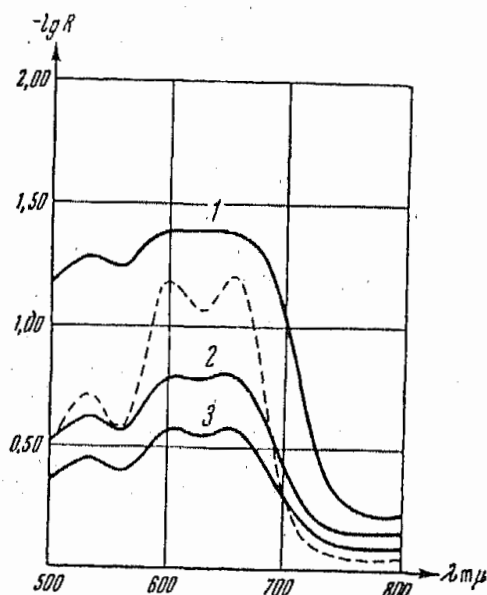


Рис. 4. Влияние степени дисперсности на спектральный ход $-\lg R(\lambda)$ для порошка стекла ПС-5, пунктирная кривая — $K(\lambda)$ для вещества частиц. 1 — $l = 1000 - 1119 \mu$, 2 — $l = 105 - 125 \mu$, 3 — $l = 44 - 53 \mu$.

дисперсности приведены на рис. 4. Сравнение их с кривой коэффициента поглощения вещества частиц $K(\lambda)$, приведенной на том же рисунке, показывает, что максимумы и минимумы полос поглощения для тех и других кривых лежат при одних и тех же длинах волн, однако форма полос различна: кривые $-\lg R(\lambda)$ всегда уплощены по сравнению с кривыми $K(\lambda)$. Полуширина полос $-\lg R(\lambda)$ больше, чем у $K(\lambda)$, максимумы и минимумы вырисовываются менее четко. Степень уплощения зависит от степени дисперсности.

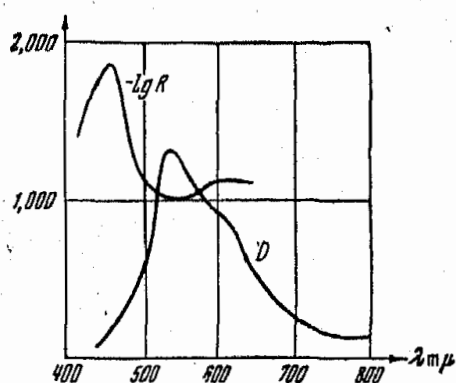


Рис. 5. Спектральный ход $-\lg R(\lambda)$ для порошка и оптической плотности $D(\lambda)$ пленки красителя кристаллический фиолетовый

Форму кривых можно характеризовать отношением

$$[-\lg R(\lambda)]_{\max} / [-\lg R(\lambda)]_{\min};$$

значения, приведенные в табл. 1 для разных веществ при разной степени дисперсности, показывают, что уплощение наиболее велико при больших частичках; чем меньше размер частиц, тем форма кривой $-\lg R(\lambda)$ ближе к форме кривой $K(\lambda)$, характеризуемой отношением $K_{\max} / K_{\min}$.

Для поглощающих веществ типа красителей вышеуказанные выводы несправедливы, так как вследствие полного («металлического»)

Таблица 1

Вещество	$[-\lg R(\lambda)]_{\text{макс}} / [-\lg R(\lambda)]_{\text{мин}}$			$\frac{K_{\text{макс}}}{K_{\text{мин}}}$
	Воздух ($n_0 \sim 1,5$)		Жидкость ($n_0 \sim 1,07$)	
	$l \sim 1000 \mu$	$l \sim 50 \mu$	$\sim 50 \mu$	
1	2	3	4	5
Стекло СЗС-8 . . .	1,85	3,1	1,4	3,5
" ЖЗС-1 . . .	1,65	2,2	1,7	4,5
" ПС-5* . . .	1,12	1,30	1,25	2,0
Пигмент кобальтовый синий	10,0	12,6	—	—

* $\lambda_{\text{мин}} = 555 \text{ м}\mu$.

отражения от наружной поверхности зерен порошка свет совсем не проникает внутрь слоя. В этом случае, по законам металлооптики, максимум оптической плотности твердой пленки вещества приблизительно совпадает с минимумом значения величины $-\lg R(\lambda)$ того же вещества в мелкодисперсной фазе. Это иллюстрируется рис. 5, на котором приведены значения $D(\lambda)$ и $-\lg R(\lambda)$ для красителя «кристаллический фиолетовый» в массивном и мелкодисперсном состояниях.

2. Зависимость спектров диффузного отражения порошков от показателей преломления связующих сред. На рис. 6⁴, 7, 8 приведены зависимости спектрального хода коэффициента диффузного отражения R порошков цветных стекол от показателя преломления связующей среды при одной и той же степени дисперсности. Из рассмотрения этих рисунков совместно с рис. 2 видно, что абсолютная величина R для данной длины волны зависит от относительного показателя преломления вещества порошка и связующей среды: $n_0 = n_{\text{вещ}} / n_{\text{ср}}$ или $n_0 = n_{\text{ср}} / n_{\text{вещ}}$ ⁵.

Как сильно сказывается изменение n_0 на изменении R , можно видеть из рис. 9⁶. Значения коэффициентов отражения очень чувствительны к малым изменениям n_0 : при $\Delta n_0 = 0,01$, $\Delta R \approx 2\%$.

Если эффективная величина частиц изменяется (например, увеличивается), то, как мы видим из сопоставления рис. 6 и 7, соответствующих порошкам стекла СЗС-8 разной дисперсности, значения абсолютных коэффициентов отражения для тех же связующих сред, согласно изложенному выше, тоже изменяются (уменьшаются).

Кривые $-\lg R(\lambda)$ (для порошков стекла ПС-5) для разных сред приведены на рис. 10.

Из сопоставления этих кривых с кривой $K(\lambda)$ (пунктирная кривая на том же рисунке) видно, что они, так же как и для различных l , качественно совпадают. Если кривые дисперсии вещества частиц и связующей среды параллельны или почти параллельны, то качествен-

⁴ Порошок представлял собой смесь частиц всех размеров с верхней границей 53μ .

⁵ При подсчете коэффициента отражения от поверхности частицы $r = [(n_{\text{ср}} - n_{\text{вещ}}) / (n_{\text{ср}} + n_{\text{вещ}})]^2$ оба выражения дают тождественные результаты, поэтому мы выбираем лишь одно выражение для n_0 (численное значение которого больше единицы).

⁶ См. сноску ⁴.

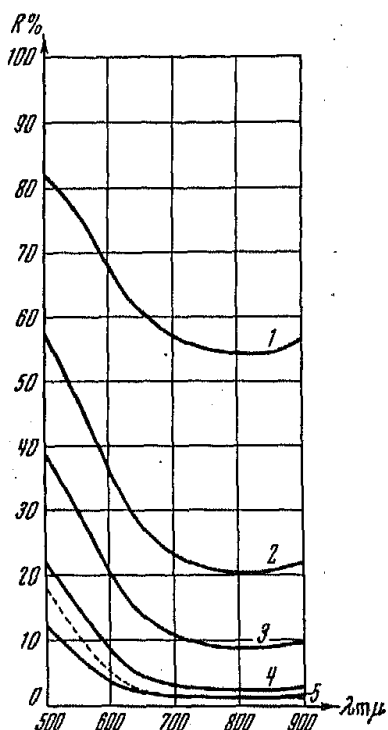


Рис. 6. Влияние связующей среды на спектральный ход коэффициента диффузного отражения от порошка стекла СЗС-8, $l = 0-53$ мкм. 1 — воздух; 2 — вода; 3 — α -бромнафталин; 4 — глицерин; 5 — октоиль; пунктир — анисовое масло

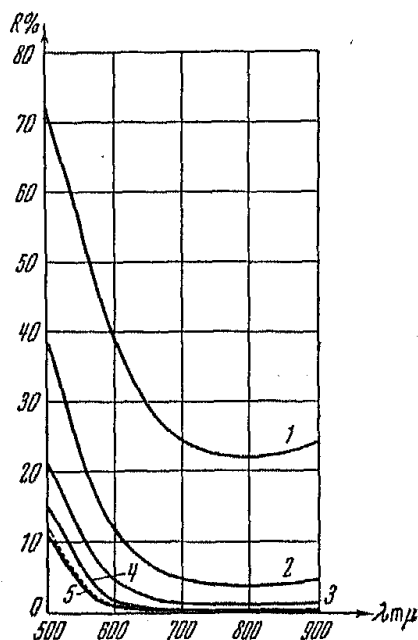


Рис. 7. Влияние связующей среды на спектральный ход коэффициента диффузного отражения от порошка стекла СЗС-8, $l = 44-53$ мкм. 1 — воздух; 2 — вода; 3 — α -бромнафталин; 4 — глицерин; 5 — октоиль; пунктир — анисовое масло

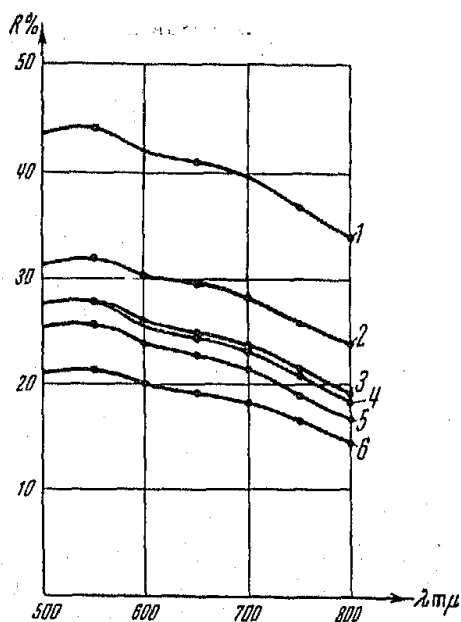


Рис. 8. Влияние связующей среды на спектральный ход коэффициента диффузного отражения от порошка карбида кремния. 1 — воздух; 2 — вода; 3 — глицерин; 4 — октоиль; 5 — анисовое масло; 6 — α -бромнафталин

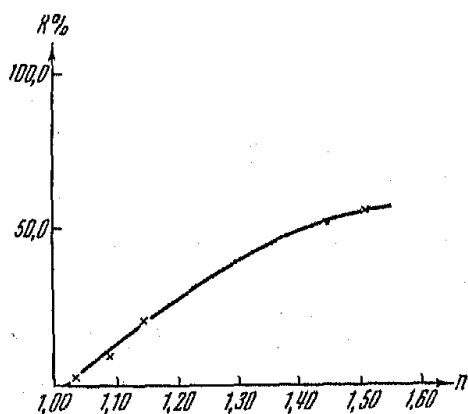


Рис. 9. Зависимость коэффициента диффузного отражения порошка стекла СЗС-8 ($l = 0-53$ мкм) от показателя преломления связующей среды

ное совпадение — $\lg R(\lambda)$ и $K(\lambda)$ тем лучше, чем больше n_0 (см. таблицу, столбцы 3, 4 и 5). Если кривая дисперсии связующей среды сильно наклонена к кривой дисперсии вещества частиц (например,

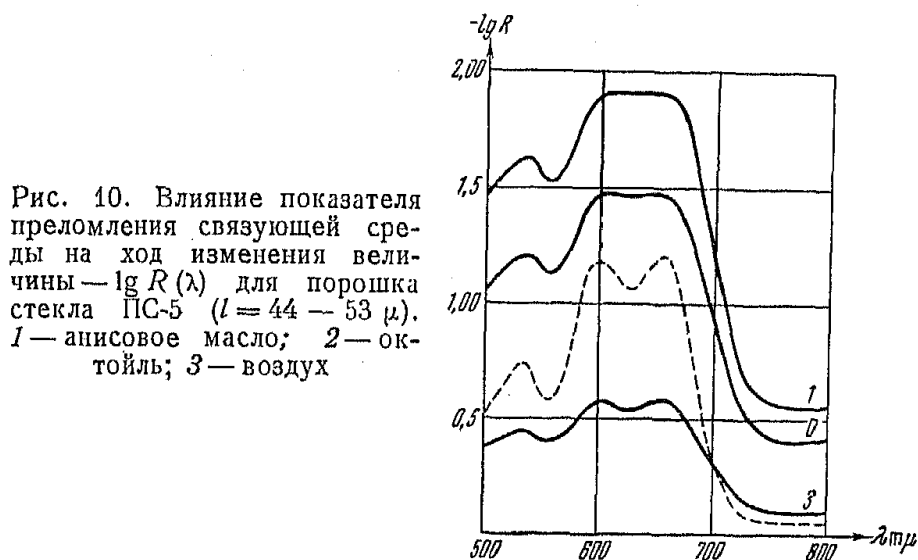


Рис. 10. Влияние показателя преломления связующей среды на ход изменения величины — $\lg R(\lambda)$ для порошка стекла ПС-5 ($l = 44 - 53 \mu$). 1 — анисовое масло; 2 — октойль; 3 — воздух

пересекает ее под большим углом), то форма кривой — $\lg R(\lambda)$ может сильно отличаться от $K(\lambda)$: положения максимумов и минимумов будут сдвинуты, а соотношение относительных значений величин максимумов изменено.

Выводы

В практических задачах определения коэффициента поглощения $K(\lambda)$ вещества по коэффициентам диффузного отражения $R(\lambda)$ порошков этого вещества следует иметь в виду, что для слабо поглощающих веществ типа цветных стекол имеет место лишь качественное соответствие спектрального хода — $\lg R(\lambda)$ и $K(\lambda)$: положения максимумов совпадают, но кривая — $\lg R(\lambda)$ оказывается расширенной по сравнению с кривой $K(\lambda)$. Это расширение тем больше, чем больше размеры частиц и чем меньше относительный показатель преломления вещества частиц и связующей среды. Поэтому для выявления истинной формы кривой поглощения вещества следует пользоваться возможно более раздробленным порошком в воздухе в качестве связующей среды.

В заключение выражаю благодарность проф. Т. П. Кравцу за постановку темы и ценные указания, проф. Б. И. Степанову за руководство работой и проф. М. В. Савостьяновой за постоянный интерес к работе и ряд ценных указаний.

Поступила в редакцию
4 сентября 1953 г.

Литература

- [1] F. Boulanger. C. R., 233, 650, 1951.—[2] J. Lecomte. Journ. de phys. et lerad., 12, 827, 1951.—[3] L. Bodo. Acta Phys. Acad. Sci. Hungar., 1, 135, 1950.—[4] В. В. Антонов-Романовский и М. М. Эпштейн. ДАН СССР, 64, 483, 1949.—[5] А. И. Сидорова и А. Н. Теренин. Изв. АН СССР, ОХН, № 2, 152, 1950; А. И. Сидорова. ДАН СССР, 72, 327, 1950.—[6] Н. Е. Веденеева, Журн. физ. химии, 21, 881, 1947; Коллоидн. журн., 12, 17, 1950.—[7] З. В. Жидкова. Исследование в области хроматографии (Труды Всесоюзного совещания по хроматографии 21—24 ноября 1950 г.), Изд-во АН СССР, Москва,

1952.—[8] G. Kortüm u. M. Kortüm-Seiler. ZS. Naturforsch., 2a, 652, 1947; G. Kortüm u. H. Schöttler. ZS. Elektroch., 57, 353, 1953; G. Kortüm u. P. Hang. ZS. Naturforsch., 8a, 372, 1953.—[9] P. D. Johnson. Journ. Opt. Soc. Amer., 42, 978, 1952.—[10] М. В. Савостьянова. Изв. АН СССР, сер. физич., 17, 747, 1952.—[11] Каталог цветного стекла, № 106, Оборонгиз, Москва.—[12] ГОСТ № 3647—47 для М-20.—[13] H. K. Hammond a. J. Nimeroff. Journ. Opt. Soc. Amer., 42, 367, 1952.—[14] W. E. K. Middleton a. E. L. Sanders. Journ. Opt. Soc. Amer., 41, 419, 1951.

СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ ОКРАШЕННЫХ РАССЕИВАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ. II

О. П. Гирин и Б. И. Степанов

Теоретически исследована зависимость спектров отражения диспергированных окрашенных объектов от размеров частиц и показателя преломления связующей среды. Установлено, что спектр диффузного отражения может сильно отличаться от спектра поглощения вещества. Проведен сравнительный анализ известных выражений коэффициента диффузного отражения.

Введение

Большое число объектов, встречающихся на практике, может быть получено только в диспергированном состоянии. Они сильно рассеивают свет и, как правило, непрозрачны даже при малой толщине слоя. Единственной спектроскопической характеристикой таких объектов является спектр отражения. Он зависит от поглощательной способности частиц данного светорассеивающего слоя и иногда более или менее близок к спектру поглощения того же вещества в сплошном состоянии. Однако отражательная способность диспергированных окрашенных объектов зависит не только от коэффициента поглощения, но и от степени дисперсности (размеров частиц) и относительного показателя преломления связующей среды [1, 2]. Кроме того, спектр отражения может зависеть от углов падения и наблюдения, от формы частиц, от их расположения в пространстве и ряда других факторов. При небольшой толщине светорассеивающего слоя часть падающего света может пройти через слой. В этом последнем случае спектр отражения зависит и от толщины слоя.

До настоящего времени выдвинуты два основных способа вычисления коэффициента диффузного отражения R . Гуревич [3], а затем и некоторые другие авторы [4, 5] полагали светорассеивающий слой непрерывным и считали, что реальные слои можно заменить совокупностью бесконечного множества бесконечно тонких слоев. Коэффициенты отражения и пропускания слоя толщины Δx определяются, по Гуревичу, соотношениями

$$R(\Delta x) = r' \Delta x, \quad T(\Delta x) = 1 - (r' + k') \Delta x, \quad (1)$$

где r' и k' — эмпирические постоянные, характерные для данного слоя. Для бесконечно толстого слоя при этом получается

$$R'(\infty) = 1 + \frac{k'}{r'} - \sqrt{\left(1 + \frac{k'}{r'}\right)^2 - 1}. \quad (2)$$

Для дальнейшего выражение (2) удобно записать в виде ряда

$$R' = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k'}{r'}\right)^{-1} + \frac{1}{8} \left(1 + \frac{k'}{r'}\right)^{-3} + \frac{1}{16} \left(1 + \frac{k'}{r'}\right)^{-5} + \frac{5}{128} \left(1 + \frac{k'}{r'}\right)^{-7} + \dots \quad (3)$$

Соотношения (1) — (3) не содержат размеров светорассеивающих частиц. Между тем, согласно экспериментальным данным [1, 2], зависимость между R и размерами частиц существует.

Бодо [6] сделал попытку построить иную теорию диффузного отражения света. Он допустил, что отражение реального светорассеивающего слоя эквивалентно отражению стопой пластинок, толщина которых равна среднему диаметру частиц. Полученное им выражение для коэффициента отражения R зависит от коэффициента отражения r_0 на границе вещество — связующая среда, от коэффициента поглощения вещества k и размеров частиц l^1 . Сравнение теоретической формулы с экспериментальными данными, проведенное Бодо, показало допустимость его основного предположения. Однако совокупность экспериментальных данных, использованных Бодо, недостаточно обширна, и применимость его формулы в некоторых случаях вызывала сомнения. Следует подчеркнуть, что выражение Бодо очень громоздко и неудобно для конкретных вычислений. Этим объясняется, вероятно, отсутствие систематического исследования полученного выражения и анализа зависимости спектра отражения от размеров частиц и свойств связующей среды. Последнее для экспериментаторов наиболее существенно.

Теория диффузного отражения, учитывающая размеры частиц светорассеивающего слоя, имеет принципиальное преимущество перед теорией, исходящей из предположения о непрерывном рассеянии света. Тем не менее за последний год появились работы [2, 8, 9], систематически использующие формулы (2) и более общие формулы Гершуна [10]. Опыт показывает, что в ряде конкретных случаев они вполне применимы. Кроме того, они привлекают своей простотой, облегчающей численные расчеты и интерпретацию экспериментальных данных.

В настоящей работе получено новое, более общее выражение для коэффициента отражения, выяснены границы применимости формул Гуревича и исследована зависимость спектров отражения от размеров частиц и свойств связующей среды.

Вывод выражения для коэффициента отражения

Будем рассматривать светорассеивающий слой как совокупность элементарных светорассеивающих слоев толщины l . Толщина элементарного слоя связана со средними размерами светорассеивающих частиц и характеризует степень дисперсности данного вещества. Отдельные элементарные слои отделяются друг от друга границей, характеризующейся коэффициентом отражения r . Свет, падающий на границу раздела слоев, частично отражается (под разными углами рассеяния), частично проходит через границу. Доля прошедшего света равна $(1 - r)$. После отражения или прохождения границы свет проходит через элементарный поглощающий слой. Доля прошедшей энергии всякий раз равна $e^{-k(\lambda)l}$. Излучение, выходящее из наружного слоя, имеет сложный состав. Отдельные лучи проходят самые разнообразные пути, многократно отражаясь на разных границах. Полная энергия отражения равна сумме энергий всего бесконечного множества отдельных лучей.

Вышеприведенная модель светорассеивающего слоя может быть несколько детализована. В действительности элементарные слои отделяются друг от друга слоями связующей среды произвольной толщины. Таким образом, i -я граница между элементарными слоями состоит фактически из двух границ i' и i'' (рис. 1). Полный коэффициент отражения на обеих границах равен

$$r = 2r_0/(1 + r_0), \quad (4)$$

¹ Коэффициент отражения стопой плоскопараллельных пластинок был вычислен еще Стоксом [7]. Выражения Стокса и Бодо отличаются по форме. Проверка показала, что при численных расчетах они приводят к одинаковым результатам.

где r_0 — коэффициент отражения на границе основное вещество — связующая среда².

Для вычисления коэффициента отражения используем следующий метод. Примем за единицу энергию, падающую на первую границу

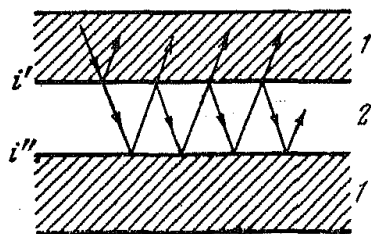


Рис. 1. Прохождение света через границу. 1 — основное вещество; 2 — окружающая среда

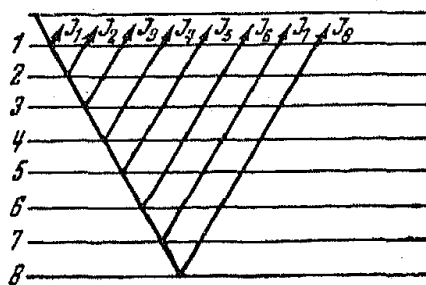


Рис. 2. Лучи, испытавшие одно отражение

раздела двух элементарных слоев. Это позволяет не учитывать (на первом этапе) более сложных условий на наружной границе. Все лучи,

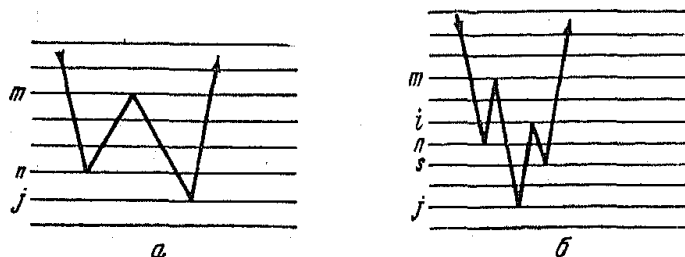


Рис. 3. а — луч, испытавший три отражения; б — луч, испытавший пять отражений

на которые распадается падающий луч, можно разделить на группы. К первой группе относятся лучи, которые возвращаются наружу, испытав только одно отражение (рис. 2). Ко второй группе относятся лучи, испытавшие три отражения (рис. 3, а). К третьей группе относятся лучи, которые испытывают пять отражений (рис. 3, б), и т. д. Полная отраженная энергия равна

$$R' = R_1 + R_3 + R_5 + R_7 + \dots \quad (5)$$

Расчет отдельных членов ряда сводится к вычислению сумм

$$\begin{aligned} R_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} r(1-r)^2 (n-1) e^{-2kl(n-1)}, \\ R_3 &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=m+1}^{\infty} r^3 (1-r)^4 e^{2kl} [(1-r)^2 e^{-2kl}]^{n+j-m}, \\ R_5 &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=m+1}^{\infty} \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{s=i+1}^{\infty} r^5 (1-r)^6 e^{2kl} [(1-r)^2 e^{-2kl}]^{n+j+s-m-i}, \\ R_7 &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=m+1}^{\infty} \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{s=i+1}^{\infty} \sum_{t=1}^{s-1} \sum_{u=t+1}^{\infty} r^7 (1-r)^8 e^{2kl} [(1-r)^2 e^{-2kl}]^{n+j+s+u-m-i-t} \end{aligned} \quad (6)$$

² Мы считаем, что коэффициенты отражения на границах i' и i'' одинаковы. Это верно строго только для недиффузного света [10]. Данное предположение сделано для упрощения расчета и приводит к приемлемым следствиям.

и т. д. Значки суммирования определяют номера границ. Их смысл в суммах R_3 и R_5 ясен из рис. 3. Выражения, стоящие под знаком сумм R_3 и R_5 , представляют собой энергию одного луча после отражений на границах n, m, j и n, m, j, i, s , соответственно, и выхода из первой границы (рис. 3). В результате суммирования получим

$$R_1 = \frac{r}{1 - (1-r)^2 e^{-2kl}} = A; \quad R_3 = A^3 (1-r)^2 e^{-4kl};$$

$$R_5 = A^5 (1-r)^2 e^{-6kl} [1 + (1-r)^2 e^{-2kl}]; \dots \quad (7)$$

$$R_{2i+1} = A^{2i+1} (1-r)^2 e^{-2(i+1)kl} \left\{ 1 + \sum_{m=2}^i C_i^m C_{i-1}^{m-2} \frac{[(1-r)^2 e^{-2kl}]^{m-1}}{m-1} \right\}.$$

В табл. 1 приведена сравнительная оценка отдельных членов ряда (5) при $r=0,02$ и разных kl . Малые значения kl соответствуют слабо поглощающим объектам и малым размерам частиц. Для частиц порядка 10^{-4} см большие значения kl соответствуют красителям ($k \sim 10^5$ см $^{-1}$).

Т а б л и ц а 1

kl	R_1	R_3	R_5	R_7	R_9
0,0005	0,488	0,111	0,053	0,032	0,021
0,005	0,400	0,060	0,018	0,007	0,003
0,05	0,153	0,003	—	—	—
0,1	0,093	—	—	—	—
1	0,023	—	—	—	—

Из таблицы видно, что при достаточно больших kl (при $r=0,02$ уже при $kl \geq 0,1$) $R_3, R_5, \dots$ исчезающе малы. В этих часто встречающихся случаях $R' = R_1$, т. е. при расчете коэффициента отражения можно учитывать только те лучи, которые испытывают всего одно отражение, и пользоваться формулой, которая намного проще не только формулы Бодо, но и формулы Гуревича. При меньших значениях kl нужно учитывать остальные члены ряда (5). Так как он быстро сходится, то вычисления несложны³.

Вычисление коэффициента отражения (5) проведено без учета наружной границы светорассеивающего слоя. Примем теперь за единицу энергию, падающую на наружную границу. Часть света r_0 отражается, часть света $(1-r_0)$ проходит внутрь слоя. Энергия, равная $(1-r_0)e^{-kl}$, достигает первой границы. Так как коэффициент отражения от совокупности всех остальных слоев равен R' , то энергия отраженного пучка равна $(1-r_0)e^{-kl}R'$. Доля энергии, равная $(1-r_0)e^{-kl}R'e^{-kl}$, достигает наружной границы. Часть этого света $(1-r_0)e^{-kl}R'e^{-kl}(1-r_0)$ выходит из слоя, часть вновь отражается и т. д. Полная энергия отражения равна

$$R = r_0 + (1-r_0)^2 e^{-2kl}R' + (1-r_0)^2 e^{-4kl}R'^2 r_0 + \dots = r_0 + \frac{(1-r_0)^2 e^{-2kl}R'}{1 - r_0 R' e^{-2kl}}. \quad (8)$$

³ Автор работы [11] решал ту же задачу с той же моделью светорассеивающего слоя, однако ограничился суммированием энергии только тех выходящих наружу лучей, которые испытывают всего одно отражение, т. е. положил $R = R_1$. Для слабо поглощающих веществ его формула непригодна.

Таблица 2

$\frac{r}{r_0}$	0,0001	0,001	0,01	0,04	0,10	0,16	0,20	0,25
kl	0,00005	0,0005	0,005	0,0204	0,0526	0,087	0,111	0,143
0,0005	0,084	0,381	0,721	0,861	0,914	0,930	0,939	0,947
0,0010	0,045	0,268	0,634	0,812	0,885	0,902	0,915	0,926
0,0020	0,024	0,172	0,532	0,735	0,840	0,865	0,881	0,896
0,0050	0,010	0,084	0,375	0,619	0,746	0,796	0,819	0,841
0,0100	0,005	0,045	0,264	0,503	0,654	0,725	0,754	0,783
0,02	0,003	0,024	0,176	0,392	0,548	0,641	0,678	0,713
0,05	0,001	0,010	0,088	0,241	0,402	0,495	0,539	0,586
0,07	0,001	0,008	0,064	0,193	0,345	0,438	0,487	0,534
0,1	0,001	0,005	0,046	0,150	0,286	0,377	0,424	0,471
0,3	—	0,002	0,017	0,063	0,144	0,211	0,249	0,296
0,5	—	0,001	0,011	0,041	0,100	0,154	0,189	0,230
0,7	—	0,001	0,008	0,032	0,081	0,127	0,158	0,197
1,0	—	—	0,007	0,026	0,067	0,107	0,134	0,170
2,0	—	—	0,005	0,021	0,055	0,090	0,114	0,145
3,0	—	—	0,005	0,020	0,053	0,087	0,111	0,143

В табл. 2 приведены численные значения коэффициента отражения бесконечно толстого светорассеивающего слоя при разных kl и $r(r_0)$. Некоторые значения R вычислены, кроме того, по формулам Бодо и Стокса. Во всех случаях они совпадают со значениями R табл. 2. Данные табл. 2 представлены на рис. 4 и 5 графически.

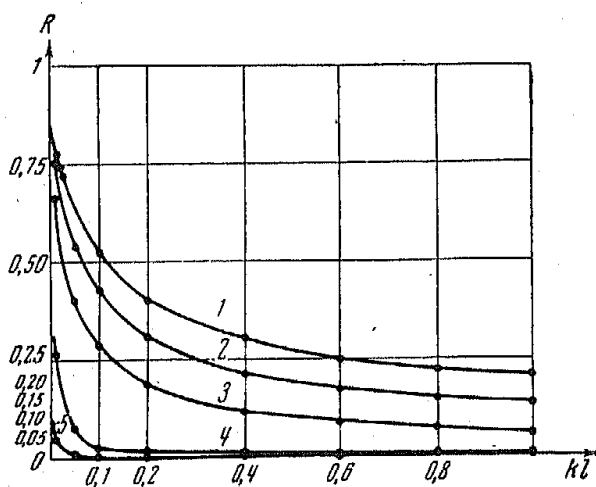


Рис. 4. Зависимость R от kl . 1 — $r = 0,30$; 2 — $r = 0,20$; 3 — $r = 0,10$; 4 — $r = 0,01$; 5 — $r = 0,001$

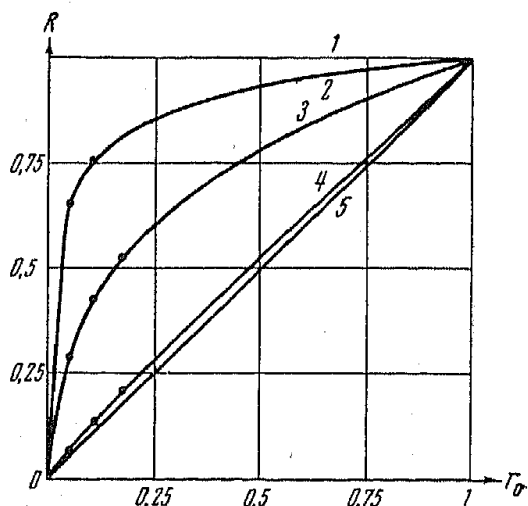


Рис. 5. Зависимость R от r_0 . 1 — $kl = 0$; 2 — $kl = 0,01$; 3 — $kl = 0,1$; 4 — $kl = 1$; 5 — $kl = \infty$

Для предельного случая слабо поглощающих, сильно диспергированных и слабо отражающих объектов, т. е. при выполнении условий

$$r \ll 1, \quad kl \ll 1, \quad (9)$$

формулы (7) упрощаются

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{kl}{r}\right)^{-1}, & R_3 &= \frac{1}{8} \left(1 + \frac{kl}{r}\right)^{-3}, \\ R_5 &= \frac{1}{16} \left(1 + \frac{kl}{r}\right)^{-5}, & R_7 &= \frac{5}{128} \left(1 + \frac{kl}{r}\right)^{-7}, \dots \end{aligned} \quad (10)$$

Нетрудно видеть, что отдельные члены ряда (10) совпадают с членами ряда (3), если

$$k' = k, \quad r' = r/l. \quad (11)$$

Последнее соотношение при малых kl и r , очевидно, выполняется; r' есть коэффициент отражения слоя в расчете на единицу толщины, r — коэффициент отражения одного элементарного слоя, $1/l$ — число элементарных слоев в единице толщины. Следовательно, при выполнении условий (9) формулы (5) и (7) полностью совпадают с формулами Гуревича. Таким образом выясняются границы применимости последних. Они неприменимы для сильно поглощающих, слабо диспергированных и сильно отражающих объектов. Они обычно применимы при малых k и l , если $r \approx 2r_0$ не превышает 0,1 (при $l = 1\mu$ для $k \leq 10^3 \text{ см}^{-1}$, при $l \approx 10\mu$ для $k \leq 10^2 \text{ см}^{-1}$, при $l \approx 1 \text{ мм}$ только для $k \leq 1 \text{ см}^{-1}$). Из формул (11) выясняется смысл k' и r' , которые при выводе (2) считались эмпирическими постоянными. Если пытаться использовать формулы (2) вне границ их применимости, то иногда можно добиться соответствия эксперименту, но константы k' и r' теряют непосредственное физическое значение.

Следует подчеркнуть, что формула (2) не точна даже внутри границ, определяемых условием (9). Она получается как частный случай (5). В то же время выражение (5) не учитывает специфических условий отражения, возникающих на границе светорассеивающего слоя, и исправляется переходом к (8). Точно такое же исправление должно быть сделано и для формул (2). Нетрудно видеть, что разность $R - R'$ меньше r_0 . При больших R она относительно мала, и ее можно не учитывать.

Сравнение с экспериментом

Расчет коэффициента отражения R произведен для вполне определенной модели светорассеивающего слоя. Справедливость этой модели можно доказать только экспериментально. Такая проверка отчасти проведена Бодо [6]. Мы воспользовались новыми данными Жидковой [1]. При сравнении с экспериментом сделано предположение, что коэффициент r_0 равен

$$r_0 = [(n_2 - n_1)/(n_2 + n_1)]^2, \quad (12)$$

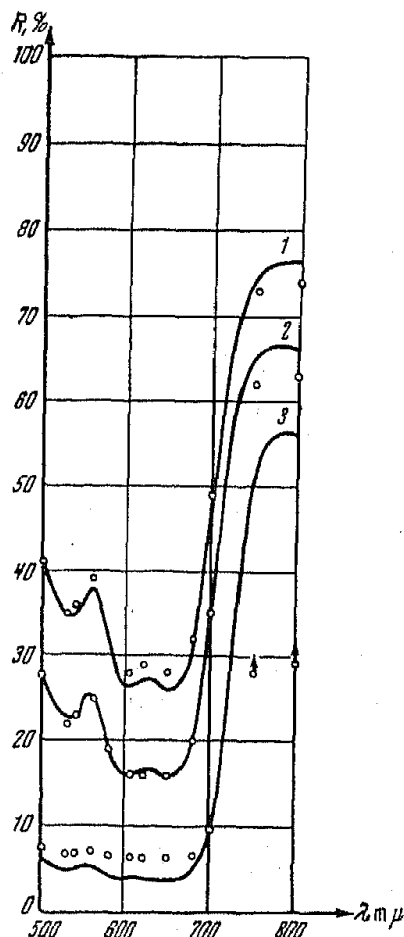
где n_1 и n_2 — показатели преломления основного вещества и связующей среды. Формула (12) строго справедлива для отражения плоских волн при нормальном падении. Применимость этой формулы для диффузного отражения пока не обоснована. Тем не менее мы воспользуемся ею и определим ее применимость путем сравнения с опытом.

На рис. 6 приведены для примера кривые $R(\lambda)$, полученные Жидковой для порошков цветного стекла ПС-5 в воздухе. Точками обозначены теоретические значения $R(\lambda)$. Значения k , l , n_1 и n_2 , необходимые для расчета, взяты из работы Жидковой. Как видно из рисунка, экспериментальные значения $R(\lambda)$ для частиц с размерами в интервалах $44-53\mu$ и $105-125\mu$ достаточно хорошо совпадают с теоретическими значениями $R(\lambda)$, рассчитанными при $l = 50\mu$ и $l = 115\mu$ соответственно. Совпадение экспериментальных и теоретических результатов при $l \sim 1000-1190\mu$ несколько хуже (кривая 3; расчетные точки приведены для $l = 1000\mu$). Однако все отклонения имеют простое объяснение. Так, например, экспериментальные значения $R(\lambda)$ в области длин волн $500-680 \text{ м}\mu$ занижены. Это связано с тем, что частицы в кювете утрамбовываются, и отражение от наружного слоя обладает заметной зеркальной составляющей, не попадающей в прибор, кото-

рый воспринимает только диффузное отражение (см. [1]). Этот эффект проявляется сильнее всего при больших размерах частиц и при тех λ , где R мало. В области 750–800 м μ также имеется расхождение экспериментальных и расчетных данных, но уже в другую сторону: экспериментальные значения R сильно завышены. Это происходит по следующей причине. Крупные частицы имеют форму пластинок. Размер $l \approx 1000\text{--}1190\text{ м}\mu$ определяет ширину пластинок, которая значительно больше их толщины. В то же самое время при утрамбовке частицы естественно располагаются таким образом, что свет проходит внутри них путь, примерно равный их толщине. Таким образом истинное значение l значительно меньше значения $l = 1000\text{ м}\mu$, принятого при расчете.

Аналогичное соответствие теоретических и экспериментальных значений $R(\lambda)$ получено нами и для порошков других стекол (СЗС-8 и ЖЗС-1), исследованных Жидковой как в воздухе, так и в различных связующих средах (октоиль, аnisовое масло и др.). Полученное

Рис. 6. Влияние степени дисперсности на спектральный ход коэффициента отражения от порошка стекла ПС-5. 1 — $l = 44\text{--}53\text{ м}\mu$; 2 — $l = 105\text{--}125\text{ м}\mu$; 3 — $l = 1000\text{--}1190\text{ м}\mu$



соответствие доказывает, что модель светорассеивающего слоя, принятая Бодо и нами, в основном правильна. Она позволяет объяснить все качественные особенности спектров отражения и производить вычисления с ошибкой не более 10–15%. Полученное соответствие доказывает далее, что толщина элементарного светорассеивающего слоя приблизительно совпадает со средними размерами частиц. Кроме того, экспериментально доказывается возможность практического применения формулы (12). Обоснование этой возможности предстоит дать в дальнейшем.

Зависимость спектрального хода коэффициента отражения светорассеивающего слоя от размеров частиц и свойств связующей среды

Основная задача настоящей работы — исследование зависимости спектров отражения диспергированных веществ от размеров частиц и свойств связующей среды, а также выяснение степени соответствия спектров отражения порошков и спектров пропускания тех же веществ в сплошном состоянии. Эту задачу проще всего решить, произведя расчет спектров отражения для некоторых конкретных случаев. Мы воспользуемся фиктивными, но наглядными примерами.

Предположим, что зависимость коэффициента поглощения k от длины волны имеет вид, изображенный на рис. 7. Масштаб оси абсцисс произволен. Пусть значение k в максимуме правой полосы равно 10^5 см^{-1} (краситель). Допустим сперва, что коэффициент отра-

жения r_0 (или, что то же, r) не зависит от λ . На рис. 8 приведены кривые $-\lg R(\lambda)^4$, полученные расчетом при помощи табл. 2 для четырех случаев: $r=0,01, l=1\mu$; $r=0,01, l=10\mu$; $r=0,1, l=1\mu$; $r=0,1, l=10\mu$. Из сравнения рис. 8

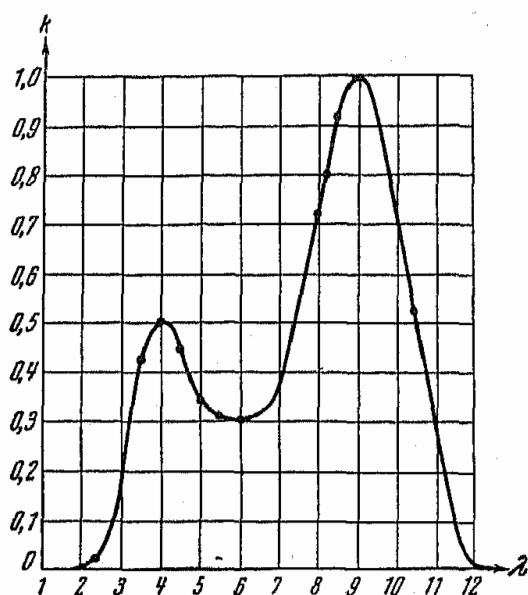


Рис. 7

с рис. 7 следует, что вместо кривой $k(\lambda)$ с двумя характерными максимумами в спектре отражения появляются (во всех четырех случаях) кривые с одним плоским максимумом. Изменение $k(\lambda)$ внутри полосы поглощения вещества не приводит к изменению кривой $-\lg R(\lambda)$, т. е. спектр отражения ни в какой мере не передает свойств спектра поглощения. На рис. 9 приведена кривая $-\lg R(\lambda)$, вычисленная при той же форме кривой $k(\lambda)$ (рис. 7), но при предположении, что значение $k(\lambda)$ в максимуме в 1000 раз меньше и равно всего 10^2 см^{-1} . Это значение $k(\lambda)$ соответствует различным окрашенным веществам. Расчеты произведены

для тех же значений $r(0,1 \text{ и } 0,01)$ и для четырех размеров частиц ($l=1000, 100, 10 \text{ и } 1\mu$). Из сравнения кривых следует, что при задан-

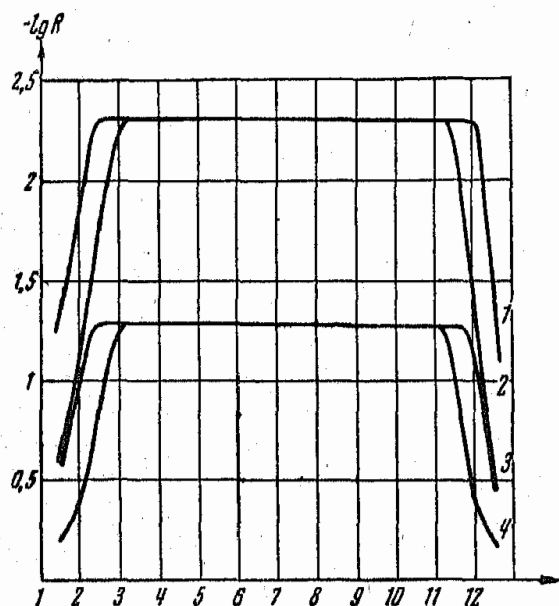


Рис. 8. Зависимость $-\lg R$ от λ при $k_{\text{макс}} = 10^5 \text{ см}^{-1}$. 1— $r=0,01, l=10\mu$; 2— $r=0,1, l=10\mu$; 3— $r=0,01, l=1\mu$; 4— $r=0,1, l=1\mu$.

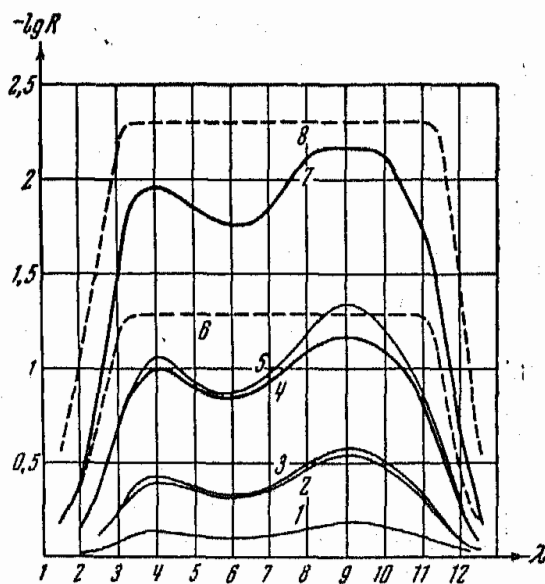


Рис. 9. Зависимость $-\lg R$ от λ при $k_{\text{макс}} = 10^2 \text{ см}^{-1}$. 1— $r=0,1, l=1\mu$; 2— $r=0,1, l=10\mu$; 3— $r=0,01, l=1\mu$; 4— $r=0,1, l=100\mu$; 5— $r=0,01, l=10\mu$; 6— $r=0,1, l=1000\mu$; 7— $r=0,01, l=100\mu$; 8— $r=0,01, l=1000\mu$.

ном r при увеличении размеров частиц l происходит непрерывное увеличение $-\lg R(\lambda)$. Одновременно с этим происходит уплощение

⁴ Построение кривых $-\lg R(\lambda)$ имеет смысл при сравнении со спектром оптической плотности недиспергированных объектов. При их изучении обычно измеряют величину $D = -\lg T(\lambda)$. Так как $T(\lambda) = T_0 e^{-k(\lambda)x}$, то оптическая плотность пропорциональна $k(\lambda)$.

кривых. При малых размерах частиц кривые $-\lg R(\lambda)$ имеют два максимума и минимум, положение которых совпадает с положениями максимумов и минимумов кривой $k(\lambda)$. Таким образом вид кривых $-\lg R(\lambda)$ напоминает вид исходных кривых $k(\lambda)$. Однако формы кривых в спектре пропускания и в спектре отражения совершенно различны. Так, например, полуширина правой полосы кривой $-\lg R(\lambda)$ для $r = 0,01$ и $l = 10 \mu$ в 1,7 раза, а полуширина левой полосы в 1,4 раза больше полуширин соответствующих полос кривой $k(\lambda)$. Высота левого максимума кривой $k(\lambda)$ вдвое меньше высоты правого максимума. Для кривой $-\lg R(\lambda)$ это отношение равно всего 1,2. При больших размерах частиц уплощение кривых $-\lg R(\lambda)$ более резко. В максимуме полосы образуется площадка с неизменным значением $-\lg R(\lambda)$. При $l = 1000 \mu$ ее размеры столь велики, что перекрывают область обоих максимумов кривой $k(\lambda)$. Следует подчеркнуть также, что уплощение кривых растет по мере уменьшения коэффициента отражения r .

Полученный результат хорошо объясняет многие до сих пор непонятные факты. В частности, при исследовании спектров отражения порошков очень часто получали плоскую площадку кривой $-\lg R(\lambda)$. В свете приведенных расчетов этот факт становится вполне естественным.

До сих пор мы проводили расчет кривых $-\lg R(\lambda)$ при предположении, что значение r — коэффициента отражения на границе раздела двух элементарных слоев — не зависит от λ . В действительности последнее осуществляется далеко не всегда. Как мы видели ранее, значение $r_0 = r/(2 - r)$ может быть представлено приближенно формулой (12). Отсюда следует, что r слабо зависит от λ только в том случае, если кривые дисперсии $n_1(\lambda)$ и $n_2(\lambda)$ параллельны друг другу. При пересечении кривых дисперсии зависимость $r(\lambda)$ особенно велика. Она велика и в пределах полосы поглощения сильно поглощающих веществ. В этом случае r_0 зависит от $k(\lambda)$ и имеет наибольшее значение в максимуме полосы.

Чтобы оценить, как зависимость r от λ может отразиться на форме кривых спектра отражения, мы произвели расчет кривых $-\lg R(\lambda)$ для трех функций $r(\lambda)$. На рис. 10 жирной кривой представлена зависимость k от λ . Как и в предыдущем случае, она выбрана фиктивно — по аналогии с обычными полосами поглощения. Масштаб по оси абсцисс произволен. По оси ординат справа отложена шкала значений k . В центре полосы поглощения (на рисунке дана левая часть полосы) k равно 10^6 см^{-1} . Пунктиром изображены три разные зависимости r от λ . Во всех случаях положено, что $r(\lambda)$ имеет максимум в центре полосы (шкала r отложена на левой оси ординат). Сплошными тонкими линиями изображены кривые $-\lg R(\lambda)$, полученные расчетом по табл. 2 для всех трех зависимостей $r(\lambda)$, причем две кривые вычислены при $l = 1 \mu$, а одна — при $l = 10 \mu$.

Из рис. 10 следует, что во всех трех случаях кривые $-\lg R(\lambda)$ совершенно не совпадают по спектральному ходу с исходной кривой

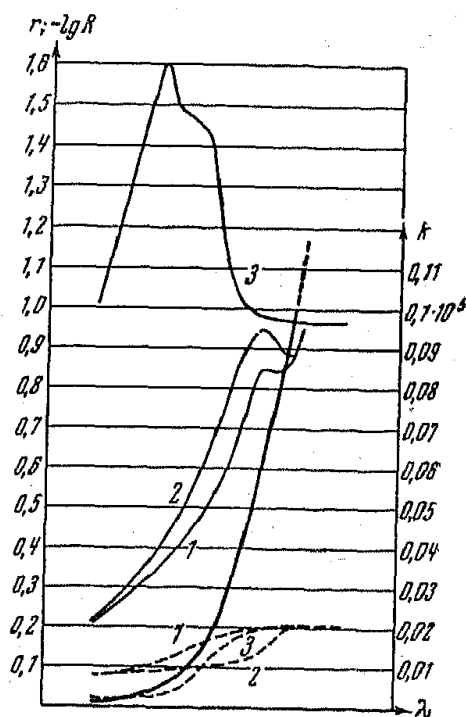


Рис. 10. Зависимость $-\lg R$ от λ при переменных $r(\lambda)$. Кривые 1 и 2 — $l = 1 \mu$; кривая 3 — $l = 10 \mu$.

$k(\lambda)$. При длинах волн, соответствующих центру полосы поглощения, имеется большой плоский участок кривых — $\lg R(\lambda)$, при других длинах волн — дополнительные максимумы и минимумы, никак не связанные с какими-то особенностями кривой $k(\lambda)$. Отсюда вытекает, что зависимость $r(\lambda)$ может оказать самое существенное влияние на вид спектра отражения. Положения максимумов $k(\lambda)$ и — $\lg R(\lambda)$ совпадают друг с другом только при отсутствии или ничтожной зависимости r от λ . Этот вывод весьма существен, так как до настоящего времени обычно полагали, что полосы спектра отражения светорассеивающих объектов отличаются от спектров пропускания недиспергированных веществ только по форме полос, а не по их положению. Этот теоретический результат вполне согласуется с данными, полученными Жидковой по нашей просьбе после проведения соответствующих расчетов [1].

Таким образом спектры отражения диспергированных объектов, как правило, сильно отличаются от спектров пропускания тех же веществ в сплошном состоянии, причем форма полос изменяется во всех случаях. В ряде случаев может наблюдаться смещение максимумов полос спектра отражения, а также появление новых максимумов. Форма полос сильно зависит от размеров частиц и связующей среды. Зависимости, полученные Жидковой экспериментально, находят полное объяснение путем прямых расчетов коэффициента отражения.

В следующей статье будут описаны методы интерпретации спектров отражения диспергированных окрашенных объектов и методы определения коэффициента поглощения $k(\lambda)$ путем измерения коэффициента отражения.

Выражение для общего члена R_{2l+1} ряда (5) получено А. П. Пришивалко.

Авторы пользуются случаем выразить благодарность проф. М. В. Савостьяновой и проф. Т. П. Кравец за интерес к данной работе и ценные дискуссии.

Поступила в редакцию
4 сентября 1953 г.

Литература

- [1] З. В. Жидкова. ЖЭТФ, этот выпуск, стр. 458. — [2] G. Kortüm u. P. Hang. ZS. Naturforsch., 8a, 372, 1953. — [3] М. М. Гуревич. Труды ГОИ, 6, вып. 57, 1931. — [4] P. Kubelka u. F. Munk. ZS. techn. Phys., 12, 593, 1931. — [5] G. Kortüm и M. Kortüm-Seiler. ZS Naturforsch., 2a, 652, 1947. — [6] L. Bodo. Acta Phys. Acad. Sci. Hungar., 1, 135, 1950. — [7] G. G. Stokes. Proc. Roy. Soc., 11, 545, 1861. — [8] G. Schwuttke. ZS. f. ang. Phys., 5, 303, 1952. — [9] А. П. Иванов, ЖЭТФ, 26, 275, 1954. — [10] А. А. Гершун. Труды ГОИ, 11, вып. 99, 1936. — [11] D. Johnson. Journ. Opt. Soc. Amer., 42, 973, 1952.

ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ВОДЫ И ВОДНЫХ РАСТВОРОВ СЕРНОКИСЛОГО НАТРИЯ В ОБЛАСТИ МЕТРОВЫХ ВОЛН

И. С. Фролов

При помощи первого метода Друде в метровом диапазоне электромагнитных волн исследована зависимость показателя преломления воды от длины волны и температуры в интервале $2-32^{\circ}\text{C}$, а также зависимость показателя преломления водного раствора сернокислого натрия от длины волны при концентрациях от 0,001 до 0,01 N .

1. Введение

Изучение свойств жидкостей в полях высокой частоты имеет длительную историю. В 1895—1897 гг. Друде обнаружил в области длин волн от 70 см и ниже аномальную дисперсию и абсорбцию в воде, спиртах и других жидкостях.

Колли [1] первый провел систематические исследования по дисперсии электромагнитных волн в жидкостях при помощи слабозатухающих волн по видоизмененному первому методу Друде и обнаружил существование узких полос аномальной дисперсии в жидкостях, аналогичных полосам дисперсии в оптической части спектра. В работах Новосильцева [2-5] проблема систематического изучения дисперсии электромагнитных волн в воде получила дальнейшее развитие. Новосильцев по усовершенствованному им первому методу Друде детально исследовал показатель преломления воды в области волн от 1 до 3,6 м. Электромагнитный спектр воды также исследовали Арденне, Гросс и Оттербайн [6], Дивильковский и Маш [7] и др.

Исследования диэлектрической проницаемости электролитов при помощи электромагнитных волн производились параллельно с исследованием воды и других жидкостей. Экспериментальные данные, полученные разными методами, оказались противоречивыми. Противоречия существуют как по вопросу о зависимости диэлектрической проницаемости от концентрации раствора, так и от частоты внешнего поля.

Первые надежные измерения, подтверждающие повышение диэлектрической проницаемости с ростом концентрации раствора, принадлежат Вину [8]. Фишер [9, 10] исследовал зависимость диэлектрической проницаемости водных растворов сильных электролитов от валентности ионов и частоты в пределах 10^6-10^7 гц при концентрациях 0,001; 0,002; 0,004 и 0,005 N . Он производил измерения в водных растворах сернокислого натрия и других жидкостях. При наибольшей концентрации (0,005 N) он, при оценке возможной ошибки измерений в 0,2 %, нашел повышение диэлектрической проницаемости одновалентных солей по сравнению со значением для воды в 0,35 %. Водный раствор соли Na_2SO_4 исследовался им только при длине волны 300 м. Как и для других солей, для этой соли получился ожидаемый подъем диэлектрической проницаемости с ростом концентрации. Его измерения диэлектрической проницаемости растворов в общем подтверждают теорию сильных растворов электролитов. Отклонения экспериментальных данных от теоретических наступают при концентрациях, больших 0,02 N .

Увеличение диэлектрической проницаемости растворов с ростом концентрации наблюдали Дмитриев и Бессонов [11], Дмитриев [12], Дивильков-

ский и Маш [31] и другие. В то же время авторы работ [14, 15] наблюдали понижение диэлектрической проницаемости с ростом концентрации раствора, а в работах [16-19] было найдено, что диэлектрическая проницаемость растворов остается неизменной с ростом концентрации.

На противоречивость опытных данных и необходимость дальнейших экспериментальных исследований дисперсии и абсорбции жидкостей в полях высокой частоты указывают Дебай [20-21], Фалькенгаген [22], Френкель [23, 24], Сканави [25], Смайс [26] и другие.

Наличие противоречивых экспериментальных данных, обусловленных трудностью эксперимента, вызывает необходимость в постановке дальнейших опытных исследований по дисперсии электромагнитных волн в жидкостях. Мы поставили перед собой задачу исследовать при помощи незатухающих электромагнитных колебаний метрового диапазона зависимость показателя преломления воды от длины волны и температуры, а также зависимость показателя преломления водного раствора сернокислого натрия от длины волны и концентрации. Чтобы сравнить результаты измерений показателя преломления растворов и воды, мы сначала провели тщательные измерения показателя преломления воды. Измерения в воде вместе с тем служили надежной проверкой стабильности работы всей установки.

2. Описание установки

Измерения показателя преломления воды и растворов производились видеоизмененным первым методом Друде. Установка состояла из двух лехеровых систем, расположенных под прямым углом. Одна из них служила для измерения длин волн в воздухе, другая — в воде и растворах. Обе системы возбуждались от одного генератора путем индуктивной связи. Генератор построен по схеме с распределенными параметрами на двух лампах ГКВ-4. Положение подвижных мостов в узлах напряжения стоячих волн обнаруживалось индикатором, соединенным с зеркальным гальванометром Физического института ЛГУ.

Резонансные кривые в воздухе получались настолько острыми, что узлы могли быть определены с точностью до 0,2 мм. Длина полуволны в воздухе определялась как средняя величина из двух отдельных значений полуволн для 1-го и 2-го, 2-го и 3-го узлов.

Длина полуволны в жидкости измерялась при той же частоте генератора на второй системе Лехера, состоящей из двух параллельных латунных проволок диаметром 1 мм, удаленных друг от друга на расстояние 20 мм, проходящих вдоль ванны для жидкости. Проволоки проходили через неподвижный входной мост, вертикальный латунный диск диаметром 9 см, толщиной 2,8 мм и сквозь подвижной мост таких же размеров, как и входной.

Подвижной мост в жидкости, прикрепленный к особой ползушке, мог перемещаться вдоль проводов системы. К ползушке, кроме моста, были прикреплены индикатор, нониус с ценою деления 0,02 мм и микрометрический винт.

Ванна для жидкости, неподвижная относительно проволок системы, размером $94 \times 29 \times 18$ см, была собрана из листового стекла толщиной 2 мм на резиновых прокладках вдоль ребер и стянута снаружи деревянным каркасом. В нее входило около 40 л жидкости. Ванна с водой экранировалась в начале системы со стороны генератора. Экраном служил прямоугольный лист из фольги размером 70×70 см с вырезанным окном против входного моста.

Положение 1-го узла определялось с большой точностью (порядка 0,05 мм) по одному лишь отсчету моста при максимуме отклонения гальванометра. Положение 2, 3 и 4-го узлов определялось из нескольких отсчетов моста.

Длина полуволны в жидкости определялась как средняя величина из всех значений расстояний от 1-го до 2-го, от 2-го до 3-го и от 3-го до 4-го узлов. Электропроводность измерялась на мостике при частоте 3000 гц.

3. Измерения показателя преломления воды в области длин волн от 419 до 440,4 см и от 468,8 до 518,2 см

Показатель преломления воды n определялся как отношение длины полуволны в воздухе $\lambda_0/2$ к длине полуволны в воде $\lambda/2$. Приведение значений n воды к 17,0° С проводилось по формуле

$$n_{17,0^\circ} = n_{t^\circ} + k(t^\circ - 17,0^\circ),$$

где $n_{17,0^\circ}$ и n_{t° — соответственно показатели преломления при температуре 17,0° и t° , а k — температурный коэффициент показателя преломления, равный, согласно нашим измерениям (см. ниже), 0,0207.

За величину абсолютной ошибки измерения длины полуволны в воздухе мы принимали ошибку отсчета моста в двух соседних узлах системы Лехера, которая не превышала 0,5 мм. Для самых коротких волн нашего участка относительная ошибка отдельного измерения составляла 0,02%. За абсолютную ошибку измерения длины полуволны в жидкости мы принимали отклонение отдельных значений от среднего, превосходившее точность отсчета. Наибольшее отклонение отдельных значений длин полуволн от среднеарифметического из 2—3 длин полуволн не превышало 0,35 мм. Отсюда максимальная ошибка отдельного измерения длины полуволны в воде составляет 0,15%.

Температура воды измерялась термометром с ценою деления 0,1°. Абсолютная ошибка в 0,1° в определении температуры при введении поправки по формуле приведения показателя к 17,0° может дать еще 0,02%. Таким образом максимальная относительная ошибка отдельного измерения n воды составляла 0,2%.

В области длин волн от 419 до 440 см получено 60 значений показателя преломления n воды в зависимости от длины волны. Измерения производились в среднем через каждые 2 мм. Среднее из всех значений n , приведенных к 17,0°, равно $9,003 \pm 0,018$. Все результаты измерений лежат в пределах ошибок 0,2%. Проводимость воды вначале была $6,5 \cdot 10^{-6}$, в конце $10 \cdot 10^{-6} \Omega^{-1}\text{см}^{-1}$.

В области длин волн от 468 до 512 см получено 75 значений n воды со средним из приведенных к 17,0° значением, равным $9,016 \pm 0,014$. Измерения производились в среднем через каждые 3 мм. Проводимость воды вначале была $10,3 \cdot 10^{-6}$, в конце $12 \cdot 10^{-6} \Omega^{-1}\text{см}^{-1}$. Загрязнение воды и увеличение ее электропроводности в пределах ошибок измерений не сказывается на результатах измерений показателя преломления.

Результаты наших измерений показателя преломления воды хорошо совпадают с результатами измерений, выполненных в физическом институте Ростовского государственного университета [2-5]. Наши измерения, как и измерения других авторов, произведенные в разное время с незатухающими колебаниями, показали отсутствие аномальной дисперсии метровых и дециметровых электромагнитных волн в воде. Аномальную дисперсию в воде наблюдали авторы, производившие измерения с затухающими колебаниями.

Богословский [27], сравнивая результаты исследований, полученные с затухающими и незатухающими колебаниями, указал на огромную разницу в величине применяющихся электрических полей в обоих случаях. По его подсчетам, амплитуды незатухающих колебаний, применявшихся в работах Ростовского государственного университета, в несколько сот раз меньше начальных амплитуд в установке Колли и других.

4. Температурная зависимость показателя преломления воды

Мы детально исследовали ход показателя преломления воды в зависимости от температуры в интервале температур от 2 до 30° С при $\lambda_0 = 430,2$ см.

Для охлаждения бутыль с водой помещалась в сосуд со снегом и льдом. При этом вода охлаждалась почти до нуля градусов. Ванна, в

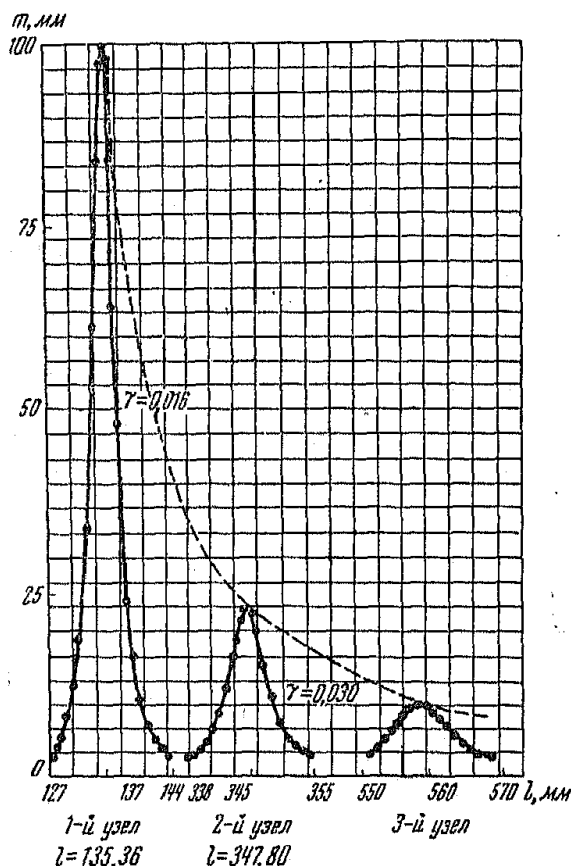


Рис. 1. Резонансные кривые в воде при $t = 4,6^\circ \text{C}$ и $\lambda/2 = 211,8$ мм; l — деления измерительной линейки (отсчет моста), m — отклонение по шкале гальванометра

которую наливали воду для измерений, окутывалась толстым слоем ваты для уменьшения теплообмена. Температура воздуха в комнате также специально понижалась. Благодаря этому за время измерений одного значения n температура воды практически оставалась неизменной.

Вблизи 4°С измерения в воде производились через 0,1—0,2°. При температуре в 4,6°С были специально сняты резонансные кривые (рис. 1), которые и в этом случае оказались симметричными и плавными. В температурном интервале от 2 до 30°С мы получили 100 значений показателя преломления воды. Точность наших измерений при температурах около 0°С такая же, как и при температурах, близких к 17,0°, т. е. 0,2%. Среднее из всех этих 100 приведенных к 17,0° значений равно $9,008 \pm 0,018$.

Результаты измерений представлены графически на рис. 2, где по оси абсцисс отложена температура, а по оси ординат — показатель преломления воды при соответствующей температуре. Из графика видно, что зависимость между n воды и температурой выражается прямой линией. При температуре 4°С вода ведет себя так же, как и при более высоких температурах.

По нашим измерениям, температурный коэффициент показателя преломления воды равен 0,0207.

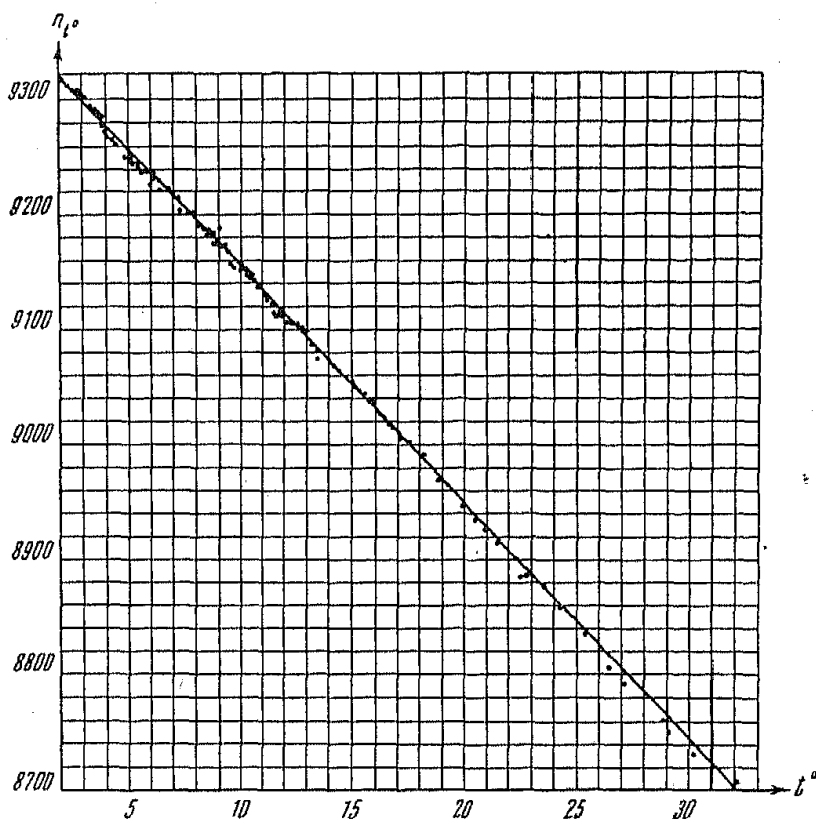


Рис. 2. График зависимости показателя преломления воды от температуры при длине волны в воздухе 4302 мм

5. Исследование показателя преломления электромагнитных волн в водных растворах Na_2SO_4 в зависимости от концентрации

Измерения показателя преломления водных растворов сильных электролитов в зависимости от концентрации и длины волны производились в двух областях длин волн: 258—285,6 см и 416,2—442,4 см, в которых вода уже была исследована, в первой области Новосильцевым [2], во второй — нами. При этих измерениях система Лехера с электролитами не экранировалась. С ростом концентрации раствора сила тока в цепях накала ламп и анодное напряжение генератора значительно увеличивались. При 0,01 N концентрации раствора сила тока в цепи накала достигла 1,85 А, анодное напряжение 700 В, сила тока в анодной цепи 100 мА. Связь генератора с системой Лехера для растворов усиливалась, также усиливалась и связь индикатора с проволоками системы. Однако, несмотря на усиление питания генератора и связи его с системой Лехера, для растворов в первой области мы смогли произвести измерения только до 0,01 N концентрации, а во второй — до 0,005 N. При более высоких концентрациях раствора электролита поглощение энергии волн было настолько велико, что уже во втором узле гальванометр давал едва заметные отклонения, а резонансные кривые чрезвычайно расплывались, так что дальше вести измерения было невозможно. Рассмотрение резонансных кривых (см. ниже, рис. 6) раствора 0,01 N концентрации показывает, что подвижная часть гальванометра не возвращается в положение равновесия даже в том случае, когда подвижной мост в системе Лехера для жидкости находится на середине расстояния между первым и вторым узлами. Это явление объясняется постоянным фоном, который обусловлен бегущими волнами, так как амплитуды отраженных волн вследствие значительного затухания сильно уменьшаются по сравнению с бегущими.

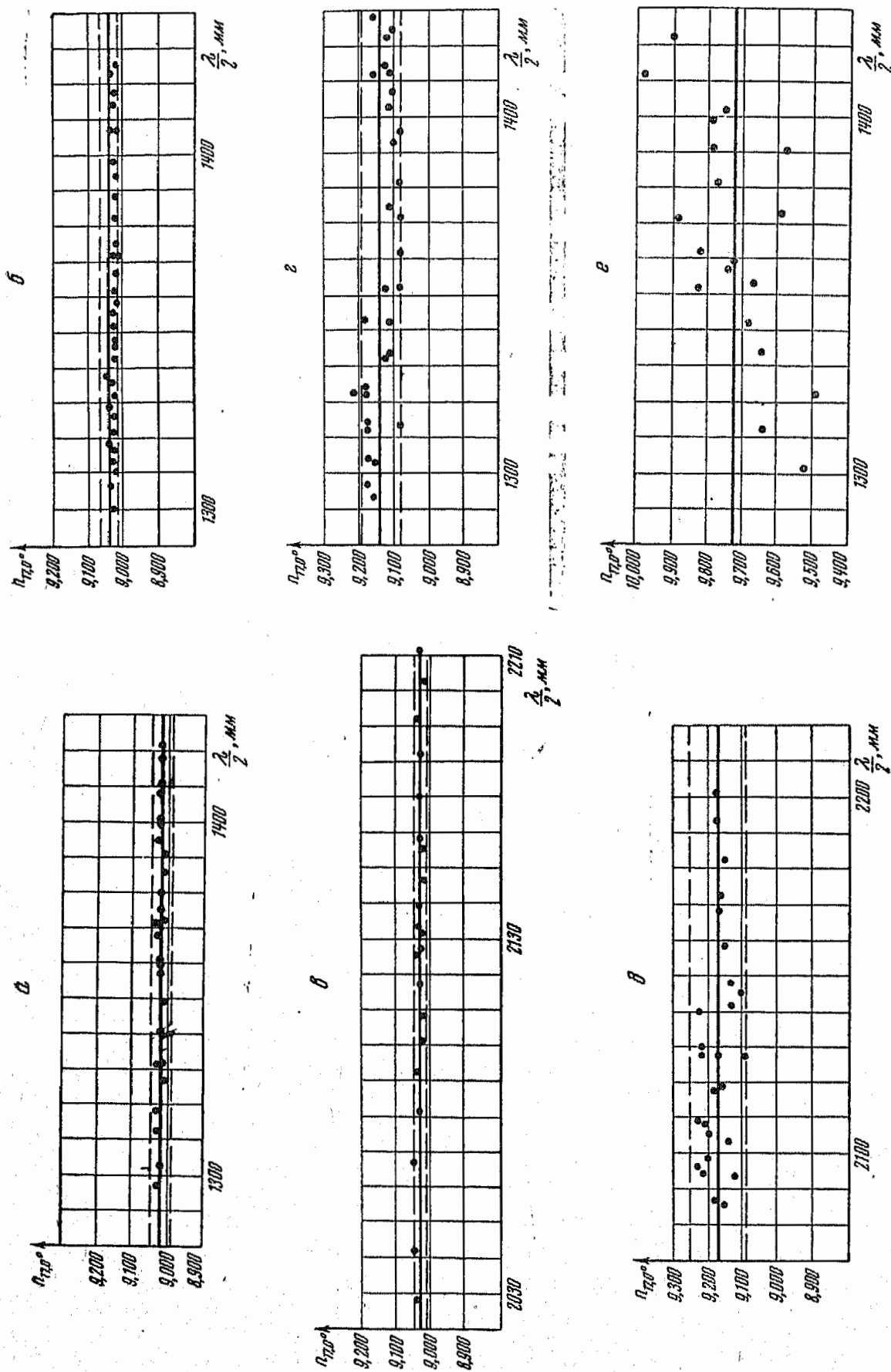


Рис. 3. Зависимость приведенных к $17,0^{\circ}\text{C}$ значений показателя преломления водных растворов Na_2SO_4 от длины волны в воздухе при концентрации раствора: а — $0,001\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,018 \pm 0,022$; б — $0,002\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,035 \pm 0,025$; в — $0,002\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,028 \pm 0,017$; г — $0,005\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,14 \pm 0,06$; д — $0,005\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,17 \pm 0,08$; е — $0,01\text{ N}$, $n_{17,0}^{\circ} = 9,72 \pm 0,20$

При каждой концентрации определялась электропроводность раствора. Температурный коэффициент показателя преломления растворов отдельно определялся при каждой концентрации, но в более узком интервале, чем для воды. Он оказался таким же, как и для воды.

Результаты измерений показателя преломления водных растворов сернокислого натрия при разных концентрациях в зависимости от длины волны представлены графически на рис. 3, где по оси абсцисс нанесены значения длины полуволны в воздухе в миллиметрах, а по оси ординат — приведенные к $17,0^\circ$ значения показателя преломления раствора. Через точки, соответствующие средним значениям $n_{17,0^\circ}$, проведены сплошные линии; пунктиром показаны пределы ошибок измерений. Из этих данных видно, что, так же как в воде, в растворах сернокислого натрия в метровом диапазоне отсутствует аномальная дисперсия.

В табл. 1 приведены средние значения $n_{17,0^\circ}$ для воды и растворов соответствующих концентраций.

Таблица 1

Наименование вещества	Концентрация раствора	Диапазон области измерений в мм	Число измеренных значений n	Приведенные к $17,0^\circ$ средние значения показателя преломления, $n_{17,0^\circ}$	Максимальная абсолютная погрешность отдельного измерения Δn	Электропроводность воды и растворов в $\Omega^{-1} \text{ см}^{-1}$
Вода	—	2500—3000 *	—	9,003	0,014	—
	—	4190—4404	60	9,003	0,018	$6,5 \cdot 10^{-8}$
	—	4688—5182	75	9,016	0,014	$10,3 \cdot 10^{-6}$
Раствор Na_2SO_4	0,001 N	2592—2847	25	9,018	0,022	$16 \cdot 10^{-5}$
	0,002 N	2600—2850	36	9,035	0,025	$2,6 \cdot 10^{-4}$
	0,002 N	4058—4424	24	9,028	0,017	$2,6 \cdot 10^{-4}$
	0,005 N	2588—2806	33	9,14	0,06	$6,2 \cdot 10^{-4}$
	0,005 N	4172—4402	26	9,17	0,08	$6,2 \cdot 10^{-4}$
	0,01 N	2602—2846	18	9,72	0,20 **	$12 \cdot 10^{-4}$

* Вода в этом диапазоне исследовалась Новосильцевым.

** Показана средняя ошибка измерений.

По этим данным построен график (рис. 4), показывающий зависимость приведенного к $17,0^\circ$ среднего значения показателя преломления водного раствора Na_2SO_4 от корня квадратного из концентрации раствора.

Наши измерения показали, что приведенное к $17,0^\circ$ значение показателя преломления водного раствора сернокислого натрия с ростом концентрации значительно увеличивается и уже при 0,01 N концентрации превышает приведенное к $17,0^\circ$ значение показателя преломления воды на 8%.

В отличие от работ Фишера [9, 10], проводившего исследования раствора сернокислого натрия при длине волны 300 м до концентрации в 0,005 N, нам удалось произвести измерения при концентрациях до 0,01 N.

Из наших измерений также следует, что при определенной концентрации показатель преломления раствора в разных участках спектра имеет одно и то же значение. Таким образом можно сделать заключение, что в области длин волн от метра и выше показатель преломления при данной температуре, а следовательно, и диэлектрическая проницаемость

раствора электролита изменяются только за счет изменения концентрации раствора, а не частоты действующего внешнего поля. К такому выводу еще раньше пришли Дивильковский и Маш [13] и другие. Если это верно, то наши результаты измерений можно рассматривать как статические значения показателя преломления растворов сернокислого натрия, которые при низких частотах очень трудно определить.

В целях контроля измерений, а также для определения затухания

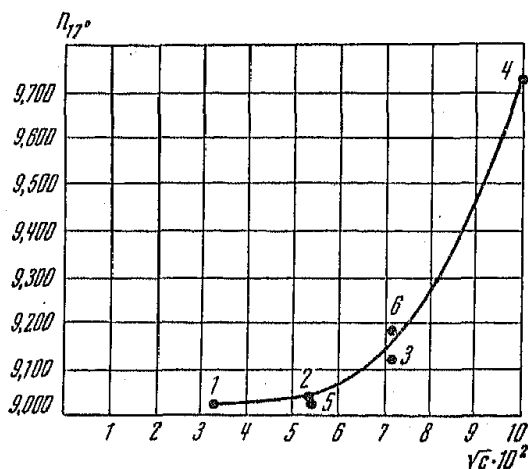


Рис. 4. Зависимость приведенных к $17,0^\circ$ значений показателя преломления водных растворов Na_2SO_4 от концентрации раствора. Точки 1, 2, 3 и 4 получены при $\lambda = 2,7$ м, точки 5 и 6 — при $\lambda = 4,3$ м

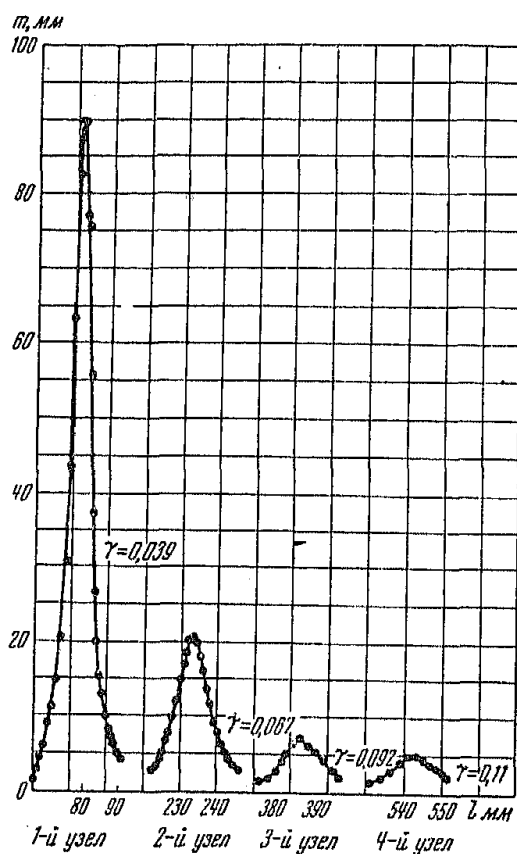


Рис. 5. Резонансные кривые для водного раствора Na_2SO_4 при концентрации $0,001$ N и $\lambda/2 = 153,5$ мм; l — деления измерительной линейки, m — отсчет по шкале гальванометра

волн в электролитах мы при каждой концентрации раствора снимали полные резонансные кривые. На рис. 5 и 6 показаны кривые для концентраций в $0,001$ и $0,01$ N.

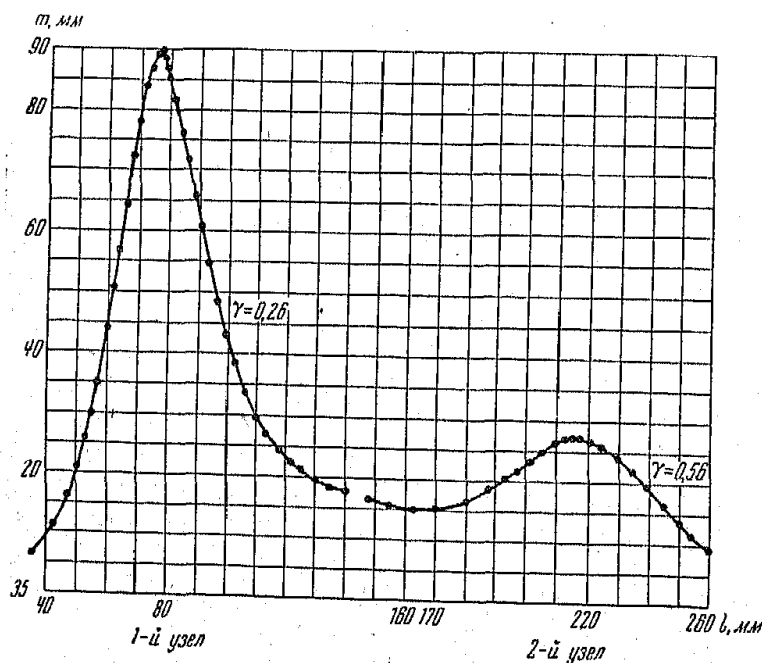


Рис. 6. Резонансные кривые в водном растворе Na_2SO_4 при концентрации $0,01$ N и $\lambda/2 = 141,0$ мм; l — деления измерительной линейки, m — отсчет по шкале гальванометра

Логарифмический декремент затухания, обусловленный водным раствором Na_2SO_4 при различных концентрациях, мы определяли по резо-

нансным кривым для первых узлов, полученных в воздухе и растворах. Из затухания, обусловленного раствором и проволоками, мы вычитали затухание, зависящее от проволок, и таким образом находили затухание раствора той или иной концентрации. Результаты расчета затухания для латунной проволоки диаметром в 1 мм в воздухе, воде и растворах приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2

Наименование вещества	Длина полу- волны в см	Логарифмический декремент затухания		
		из резонансных кривых первых узлов	на 1 см длины проволок и среды	на 1 см длины среды
Воздух	129,1	0,0079	0,0000306	—
Вода	21,16	0,16	0,000768	0,000737
Раствор Na_2SO_4				
Конц. 0,001 N	15,35	0,039	0,00254	0,00251
„ 0,002 N	15,07	0,054	0,00358	0,00355
„ 0,005 N	14,98	0,14	0,00906	0,00903
„ 0,01 N	14,10	0,26	0,0186	0,01857

Наши исследования показателя преломления воды и водных растворов сернокислого натрия приводят к следующим выводам:

1) С повышением температуры от 0 до 30°C показатель преломления воды и растворов линейно уменьшается.

2) В водных растворах сернокислого натрия, так же как и в воде, в метровом диапазоне электромагнитных волн отсутствует аномальная дисперсия.

3) При данной температуре с ростом концентрации показатель преломления раствора Na_2SO_4 возрастает, и при концентрации в 0,01 N приращение достигает 8% от величины показателя преломления воды. Судя по результатам наших измерений, а также по данным других авторов, можно сказать, что в метровом и более длинноволновом диапазоне этот рост показателя преломления, а следовательно, и диэлектрической проницаемости растворов, обусловлен повышением концентрации раствора и не зависит от частоты приложенного электромагнитного поля.

Найденные нами значения показателя преломления растворов Na_2SO_4 могут быть использованы для определения диэлектрической проницаемости этих растворов в статическом поле.

Ульяновский педагогический
институт

Поступила в редакцию
7 мая 1953 г.

Литература

- [1] А. Р. Колли. Исследование дисперсии в электрическом спектре жидкостей, Одесса, 1908.— [2] Н. С. Новосильцев. ЖРФ-ХО, 11, 507, 1929.— [3] Н. С. Новосильцев. Уч. зап. Ростовск. гос. ун-та, 2, 42, 1938.— [4] Н. С. Новосильцев. Уч. зап. Ростовск. гос. ун-та, 3, 126, 1939.— [5] М. М. Алимова и Н. С. Новосильцев. Труды Сев.-Кавказск. гос. ун-та, 1, 149, 1934.— [6] M. Ardenne, O. Gross u. G. Otterbein. Phys. ZS., 37, 533, 1936.— [7] М. А. Дивильковский и Д. И. Маш. ЖЭТФ, 10, 520, 1940.— [8] M. Wien. Ann. d. Phys., 11, 429, 1931.— [9] E. Fischer. Phys. ZS., 17, 585, 1935.— [10] E. Fischer. Phys. ZS., 26, 697, 1936.— [11] В. А. Дмитриев и Л. К. Бессонов. ЖЭТФ, 8, 471, 1938.— [12] В. А. Дмитриев. ЖЭТФ, 8, 1178, 1938.— [13] М. А. Дивильковский и Д. И. Маш. ЖЭТФ, 10, 1257, 1940.— [14] G. Fischer u. W. Shafeld. Ann. d. Phys., 25, 450, 1936.— [15] M. Seeberger. Ann. d. Phys., 16, 77, 1933.— [16] E. Plötze. Ann. d. Phys. 18, 297, 1933.— [17] Н. Н. Малов. ДАН

- СССР, 24, 437, 1939.— [18] Н. Н. Малов. Журн. техн. физики, 9, 2004, 1939.— [19] М. А. Дивильковский и Д. И. Маш. ЖЭТФ, 10, 520, 1940.— [20] П. Дебай и Г. Закк. Теория электрических свойств молекулы, ОНТИ, М.—Л., 1936.— [21] П. Дебай. Усп. физ. наук, 21, 120, 1939.— [22] Г. Фалькенгаген. Электролиты, ОНТИ, М.—Л., 1935.— [23] Я. И. Френкель и А. И. Губанов. Усп. физ. наук, 24, 68, 1940.— [24] Я. И. Френкель. Кинетическая теория жидкостей, Изд-во АН СССР, 1945.— [25] Г. И. Сканапи. Физика диэлектриков, ГИТТЛ, М.—Л., 1949.— [26] Ч. Смайс. Диэлектрическая постоянная и структура молекулы, ОНТИ, М.—Л., 1937.— [27] Е. В. Богословский. Уч. зап. Ростовского гос. ун-та, вып. 6, 1935.
-

НАРУШЕНИЕ ЗАКОНА БОГУСЛАВСКОГО — ЛЭНГМЮРА ПРИ НАГРЕВАНИИ ВОЛЬФРАМОВОГО КАТОДА ВАКУУМНОЙ ЛАМПЫ ИМПУЛЬСОМ ТОКА БОЛЬШОЙ ПЛОТНОСТИ

С. В. Лебедев

При нагревании вольфрамового катода лампы импульсом тока большой плотности анодный ток во много раз превышает обычную величину, соответствующую закону Богуславского — Лэнгмюра. Нарушение этого закона вызвано изменением состояния вольфрама под действием тока большой плотности и не связано с нейтрализацией пространственного заряда ионами.

В статье [1] было выяснено, что при нагревании вольфрамовой проволоки током большой плотности электронная эмиссия с поверхности этой проволоки во много раз превышает обычное значение эмиссии с вольфрама при температуре плавления. Из этого результата был сделан вывод, что под действием тока большой плотности вольфрам приходит в аномальное состояние. В [1] исследовалось только состояние проволоки, а явления, происходящие между проволокой (катодом) и анодом, рассматривались лишь постольку, поскольку необходимо было учитывать величину ионного тока. Ионный ток оказался малым и не составлял заметной доли полного анодного тока. Однако явления, разыгрывающиеся в наших опытах в пространстве вокруг исследуемой проволоки, приобретают самостоятельный интерес именно потому, что число ионов в этом пространстве мало сравнительно с числом электронов.

Действительно, известно, что в лампах при хорошем вакууме в случае не слишком больших анодных напряжений анодный ток ограничивается не эмиссией катода (если эмиссия достаточно велика), а отрицательным потенциалом пространственного заряда. При этом величина анодного тока может быть найдена по закону Богуславского — Лэнгмюра. Но в наших опытах анодный ток во много раз превышал значение тока, найденное по этому закону. Такой результат может объясняться тем, что имеющиеся в лампе ионы (несмотря на их малое число) нейтрализуют пространственный заряд и таким образом создают условия, при которых закон Богуславского — Лэнгмюра неприменим. Результаты оценки величины ионного тока, которая была сделана в [1], не позволяют сказать ничего определенного о том, связано ли наблюдаемое нарушение этого закона с появлением ионов или вызвано другими причинами.

В настоящей статье описаны опыты, поставленные для выяснения причин несоблюдения закона Богуславского — Лэнгмюра при нагревании вольфрамового катода лампы импульсом тока большой плотности. В наших опытах катоды из вольфрамовой проволоки выдерживали в лучшем случае несколько десятков импульсов. Ниже рассматриваются результаты только тех опытов, после каждого из которых проволока остается целой.

1. Сравнение величин анодных токов при стационарном нагревании катода и нагревании катода импульсом тока большой плотности

Измерение анодного тока производилось в трехэлектродной лампе, катодом которой служила нить из чистого вольфрама диаметром 0,1 мм, длиной $l = 1$ см. Для уменьшения охлаждения концов нити верхняя часть ножек, к которым она приваривалась, делалась из нике-

левой проволоки диаметром 0,3 мм. При стационарном накале нити эта часть ножек разогревалась до желтого каления. Два других электрода, анод и коллектор ионов, представляли собой никелевые квадратики площадью по 0,5 см² каждый, расположенные на расстоянии 1 см от нити. Перед измерением электроды прокаливались под вакуумом не менее 20 мин. при светлокрасном калении. Откачка лампы производилась непрерывно. Увеличение давления в лампе от $2 \cdot 10^{-6}$ до $2 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст., а также его уменьшение путем заполнения ловушки

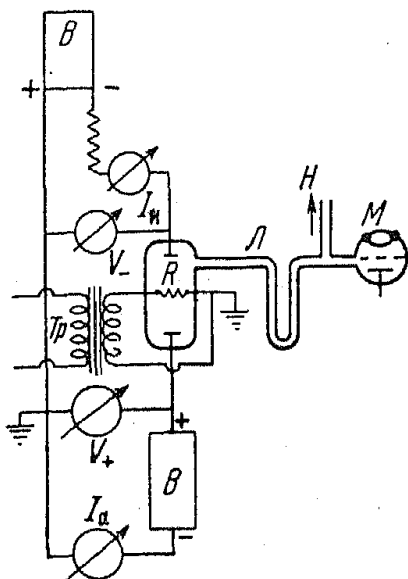
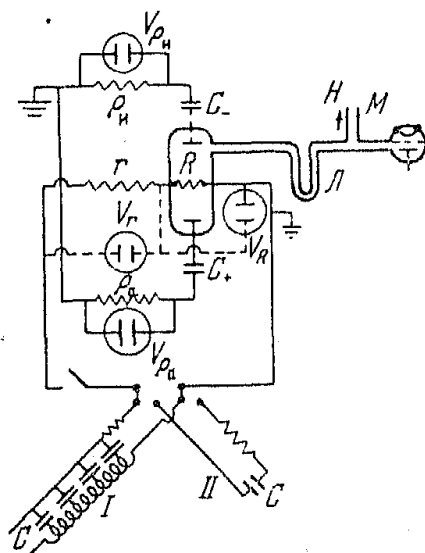


Рис. 1. Схема установки для измерения анодного тока и тока I_n при стационарном накале нити. R — нить, $Л$ — ловушка, $М$ — манометр, $Н$ — насос, $В$ — выпрямители, Tr — трансформатор накала, V_+ и V_- — напряжения на электродах, измеряемые электростатическими вольтметрами



тока i при помощи двухлучевого катодного осциллографа регистрировались напряжения на постоянных сопротивлениях ρ_a , ρ_n , r и на самой нити R . Напряжение на анод и на коллектор ионов подавалось от конденсаторов C_+ и C_- , которые заряжались до разности потен-

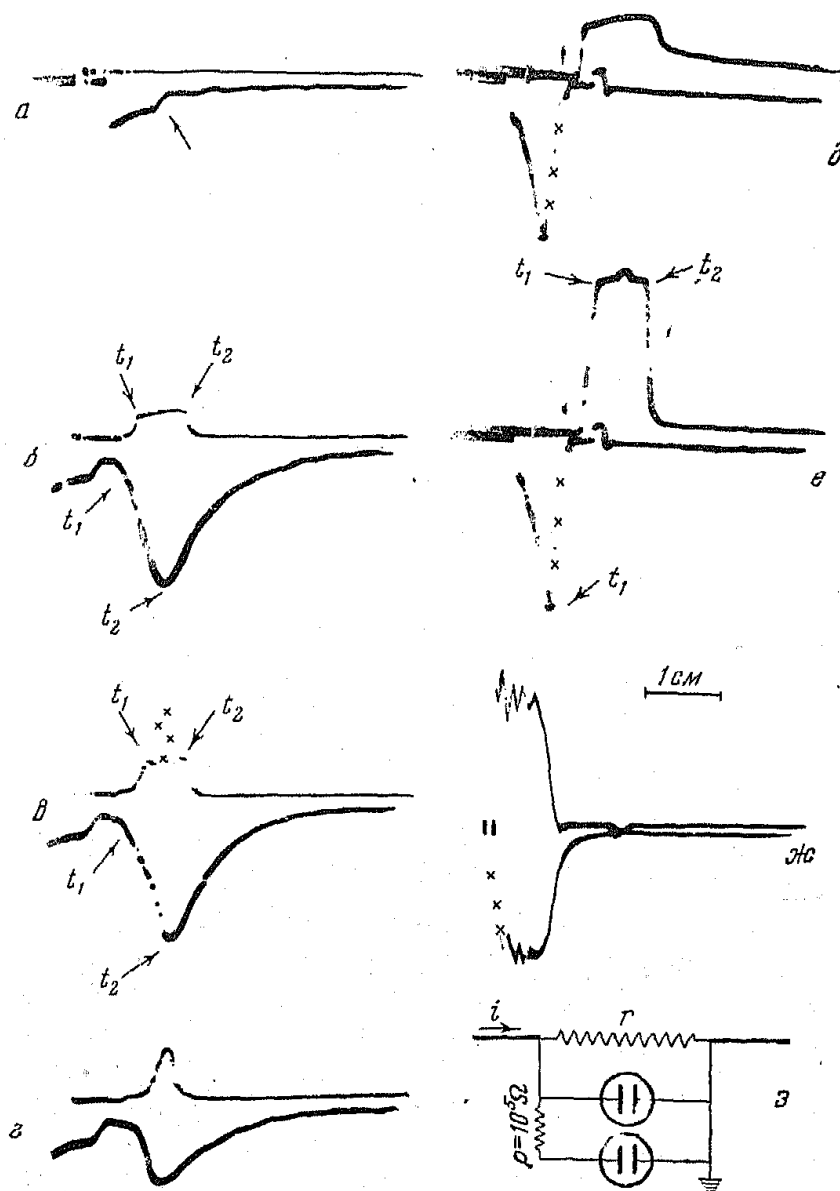


Рис. 3. Осциллограммы, полученные с вольфрамовой проволокой диаметром 0,1 мм, длиной $l = 1$ см, ток $j \approx 3,4 \cdot 10^6$ А/см². Кривые а, б, в, г —верху $V_{\rho_a}(t) = \rho_a I_a(t)$, внизу $V_{\rho_n}(t) = \rho_n I_n(t)$. Кривые д, е —верху $V_{\rho_a}(t)$, внизу $V_R(t) = i(t) R(t)$. Кривая ж —верху $V_r(t) = ri(t)$, внизу то же через $\rho = 10^5 \Omega$ по схеме з. Условия опытов приведены в табл. 1. Чувствительность осциллографа $a = 105$ В/см, масштаб времени $b = 2,5 \cdot 10^{-6}$ сек/см. На рис. 3 а, б, в, г, д, е — верхняя кривая смещена относительно нижней на 0,25 см вправо. Нулевые линии осциллограмм б — е рис. 3 совпадают с кривыми а рис. 3

циалов V_+ и V_- (рис. 2). Полученные осциллограммы $V_{\rho_a}(t) = \rho_a I_a(t)$, $V_{\rho_n}(t) = \rho_n I_n(t)$, $V_r(t) = ri(t)$ и $V_R(t) = R(t)i(t)$ давали необходимые сведения об анодном токе I_a , токе I_n , импульсе тока i и сопротивлении нити R для любого момента времени t в течение опыта. Примеры осциллограмм приведены на рис. 3. Осциллограммы рис. 3, б, в, г сняты с одного и того же кусочка вольфрамовой проволоки при $V_+ = 400$ В, $\rho_a = 10^2 \Omega$, $V_- = -1800$ В, $\rho_n = 10^5 \Omega$. Верхние кривые

рис. 3, б, в, г представляют собой осциллограммы² $V_{pa}(t)$, а нижние кривые — осциллограммы $V_{pn}(t)$; кривые рис. 3, а — нулевые линии осциллограмм $V_{pa}(t)$ и $V_{pn}(t)$. Отклонение начала нулевой линии $V_{pn}(t)$ от прямой вызвано наводкой со стороны тока i на обкладки осциллографа, замкнутые на большое сопротивление $\rho_n = 10^5 \Omega$. При выключении тока i эта наводка пропадает. По осциллограммам рис. 3, б и в измерялись силы токов I_a и I_n . Результаты измерения для моментов времени, отмеченных на рис. 3 значками t_1 и t_2 , приведены в табл. 1. В этой таблице приведены также величины тока I_a^* для случая стационарного накала катода той же лампы при тех же³ V_+ и V_- .

Таблица 1

Рис. 3	Условия опыта					$t=t_1$				$t=t_2$				Стационарный накал
	V_0 (кВ)	ρ_a (Ом)	ρ_n (Ом)	V_+ (В)	V_- (В)	I_a (А)	I_n (А)	I_a^* (А)	I_a/I_n	I_a (А)	I_n (А)	I_a^* (А)	I_a/I_n	I_a^* (А)
а	5	10^3	—	300	0	0,07	—	21	—	0,1	—	—	—	$3,3 \cdot 10^{-3}$
б	5	10^3	—	300	0	0,21	—	63	—	0,22	—	—	—	$3,3 \cdot 10^{-3}$
в	5,1	10^2	10^5	400	-1800	0,25	$\sim 10^{-4}$	360	~ 2500	0,35	$\sim 1,5 \cdot 10^{-3}$	230	—	$7 \cdot 10^{-1}$
г	5,1	10^2	10^5	400	-1800	0,4	$\sim 10^{-4}$	570	~ 4000	0,5	$\sim 1,5 \cdot 10^{-3}$	330	—	$7 \cdot 10^{-1}$
д	5,1	10^2	10^5	400	-1800	0,65	$\sim 10^{-4}$	880	~ 6500	—	—	—	—	$7 \cdot 10^{-1}$

Голубое свечение не возникает

Приведенные в таблице значения отношения I_a/I_n^* показывают, что при нагревании нити импульсом тока большой плотности анодный ток достигает во много раз большей величины, чем при стационарном накале.

Таблица 2

p (мм рт. ст.)	I_a^* (амперы)	I_n (амперы)
$2 \cdot 10^{-5}$	$0,7 \cdot 10^{-3}$	Меньше 10^{-6}
$2 \cdot 10^{-4}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$	То же
$6 \cdot 10^{-4}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	» »
$9 \cdot 10^{-4}$	$2,0 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-3}$
10^{-3}	$3,0 \cdot 10^{-3}$	$15 \cdot 10^{-6}$

приведены в табл. 2. При увеличении давления выше 10^{-3} мм рт. ст. в лампе вспыхивало голубое свечение, причем ток I_a резко возрастал до величины, ограниченной свойствами внешней цепи (выпрямитель не мог давать ток, больший чем 0,25 А). Известно^[2], что появление голубого свечения всегда сопровождается резким увеличением анодного тока до значения тока насыщения, если только свойства анод-

² В некоторых местах линия осциллограмм получалась едва заметной. Крестиками отмечено положение линий в тех местах, где они не видны на отпечатках, но заметны на оригиналах.

³ При импульсном накале нити анодное напряжение $V_a = V_+ - \rho I_a$ было меньше, чем для такого же значения V_+ в стационарных опытах, при которых $V_+ \approx V_a$.

ной цепи не ограничат его нарастание меньшей величиной. Табл. 2 показывает, что если исключить область голубого свечения, то для нашей лампы при стационарном накале нити путем ухудшения вакуума нельзя увеличить I_a^* больше, чем в 4—5 раз. В рассматриваемых импульсных опытах голубое свечение отсутствует, но анодный ток достигает значительно большей величины, чем $5I_a^*$.

В отсутствие голубого свечения в наших опытах с импульсным нагреванием катода можно убедиться по следующим признакам:

1) в опытах⁴ 3, б и 3, в ток I_a достигает только 0,35 и 0,5 А, тогда как при вспышке голубого свечения ток I_a был бы равен $\sim V_+/ \rho_a = 2A$;

2) голубого свечения не видно, хотя при нагревании нити импульсом тока i появление свечения не осталось бы незамеченным, так как после выключения тока i нить остывает сравнительно медленно. Эти соображения подтверждаются тем, что при плохо откачанной лампе вспышка голубого свечения наблюдается, причем I_a достигает приблизительно 2А. Кроме того, появление вспышки приводило к разрядке конденсатора C_1 , чего не происходило при хорошем вакууме, когда голубого свечения не видно.

Итак, в случае нагревания нити импульсом тока большой плотности при отсутствии голубого свечения анодный ток в лампе превышает его значение I_a^* при стационарном накале нити в хорошем вакууме не в 4—5 раз (что можно было бы объяснить ухудшением вакуума), а в десятки и сотни раз.

2. Сопоставление изменения во времени тока I_a и тока I_n

Как отмечалось в разделе 1, в опыте 3, б в момент t_1 ток I_a во много раз превышает обычное значение анодного тока, найденное по закону Богуславского — Лэнгмюра. По осциллограммам рис. 3, б видно, что быстрое возрастание тока I_a происходит до момента t_1 , когда ток I_n еще очень мал. (Нарастание тока I_a видно по отклонению верхней кривой рис. 3, б вверх, а нарастание тока I_n — по отклонению нижней кривой вниз. Масштаб по оси ординат осциллограммы тока I_n в $\rho_n / \rho_a = 10^3$ раз больше, чем масштаб осциллограммы тока I_a .)

Далее, в течение сравнительно большого отрезка времени $t_2 - t_1$ анодный ток возрастает весьма незначительно, тогда как ток I_n увеличивается во много раз. В момент t_2 анодный ток начинает резко спадать и при большом I_n уменьшается до значения, по порядку величины соответствующего закону Богуславского — Лэнгмюра. Отсюда ясно, что даже сравнительно большое число ионов в лампе, соответствующее максимальному значению тока I_n , не является причиной аномально большого значения анодного тока. Однако необходимо учесть, что ионы в лампе могут быть двоякого происхождения: они могут возникать либо в полях между электродами, либо в поле, направленном вдоль нити и связанном с прохождением по ней тока i . Поле вдоль нити существует только до момента t_1 , когда ток i выключается. [Это видно, например, из рис. 3, е, на котором верхняя кривая — осциллограмма $V_{pa}(t) = \rho_a I_a(t)$, а нижняя — осциллограмма $V_R(t) = R(t) i(t)$.] Ионы, возникающие в этом поле, должны появляться вблизи нити, т. е. в области пространственного заряда, и их влияние на ток I_a может оказаться более существенным, чем влияние

⁴ Номера осциллограмм и номера опытов, в которых эти осциллограммы получены, совпадают.

ионов, создаваемых анодным полем. Поэтому можно предположить, что появление ионов за счет поля вдоль нити и является причиной необычного нарастания тока I_a до момента t_1 . Однако в таком случае необычный ток I_a должен был бы упасть в течение времени $t_2 - t_1$ после выключения тока i . Действительно, судя по осциллограммам рис. 3, б, в, д, е, $t_2 - t_1$ превышает $1,5 \cdot 10^{-5}$ сек. За такое время положительные ионы, находящиеся в электронном облаке, должны были бы рекомбинировать или выйти из области пространственного заряда за счет скоростей, которыми они обладали в момент t_1 . Поскольку в действительности при $t_1 < t < t_2$ ток I_a не уменьшается, то рассматриваемое предположение отпадает. Из сказанного ясно, что в момент t_2 в лампе могут присутствовать только ионы, возникшие в полях между электродами, но, как отмечалось выше, сравнительно большое число ионов в момент t_2 не препятствует падению тока I_a до величины $\approx I_a^*$. Таким образом большую величину I_a по сравнению с I_a^* нельзя объяснить появлением в лампе ионов любого происхождения.

При рассмотрении осциллограмм рис. 3, б, в, г может возникнуть опасение, что при $t > t_2$ ход осциллограмм $V_{pн}(t)$ отражает не убывание тока I_n , а процесс стекания заряда с пластин осциллографа через большое сопротивление ρ . В несостоятельности этого опасения можно убедиться следующим путем. На рис. 3, ж приведены контрольные осциллограммы, которые были получены при подключении обкладок осциллографа к сопротивлению r по схеме, показанной на рис. 3, з. Спадающий участок верхней осциллограммы 3, ж показывает скорость убывания напряжения^б на сопротивлении r . Более пологий ход соответствующих участков нижней осциллограммы рис. 3, ж, по сравнению с верхней, характеризует скорость разряда обкладок осциллографа через сопротивление $\rho = 10^5 \Omega$. Осциллограммы $V_{pн}(t)$ рис. 3, б, в, г при $t > t_2$ имеют более пологий ход, чем нижняя осциллограмма рис. 3, ж при падении напряжения на сопротивлении r . Следовательно, при $t > t_2$ осциллограммы $V_{pн}(t)$ рис. 3, б, в, г описывают более медленный процесс, чем падение напряжения на обкладках осциллографа в результате стекания заряда через $\rho = 10^5 \Omega$. То же самое непосредственно видно из сравнения осциллограмм $V_{pн}(t)$ рис. 3, б, в, г при $t > t_2$ с участком тех же осциллограмм, регистрирующим падение напряжения на обкладках осциллографа при исчезновении помехи после включения тока i . Этот участок отмечен на нулевой линии осциллограмм $V_{pн}(t)$ стрелкой (рис. 3, а).

3. Изменение величины I_a/I_a^* при изменении импульса тока $i(t)$

В опытах по измерению анодного тока $I_a(t)$, рассматриваемых в этом параграфе, нагревание нити производилось импульсами тока i меньшей плотности, чем в опытах 3, б — е. В момент t_0 включения нагревающего тока плотность тока в нити $j(t_0) \approx 8,9 \cdot 10^5 \text{ А/см}^2$. Зависимость i от t для этих импульсов ясна из осциллограммы $V_r(t) = ri(t)$, приведенной на рис. 4, з (верхняя кривая). Устройство катода, вакуум и способ регистрации анодного тока остались прежними. Анод представлял собой две никелевые пластинки площадью по 1 см^2 , расположенные по обе стороны от нити на расстоянии от нее около 1 см . Ионные токи не регистрировались.

Ток I_a^* , измеренный при стационарном накале нити при $V_+ = 700 \text{ В}$, для этой лампы оказался равным $0,055 \text{ А}$. По осциллограммам $V_{pa}(t)$,

^б Импульс тока $i(t)$, протекавшего по сопротивлению r , в этом опыте отличался от $i(t)$ в опытах 3, б, в, г.

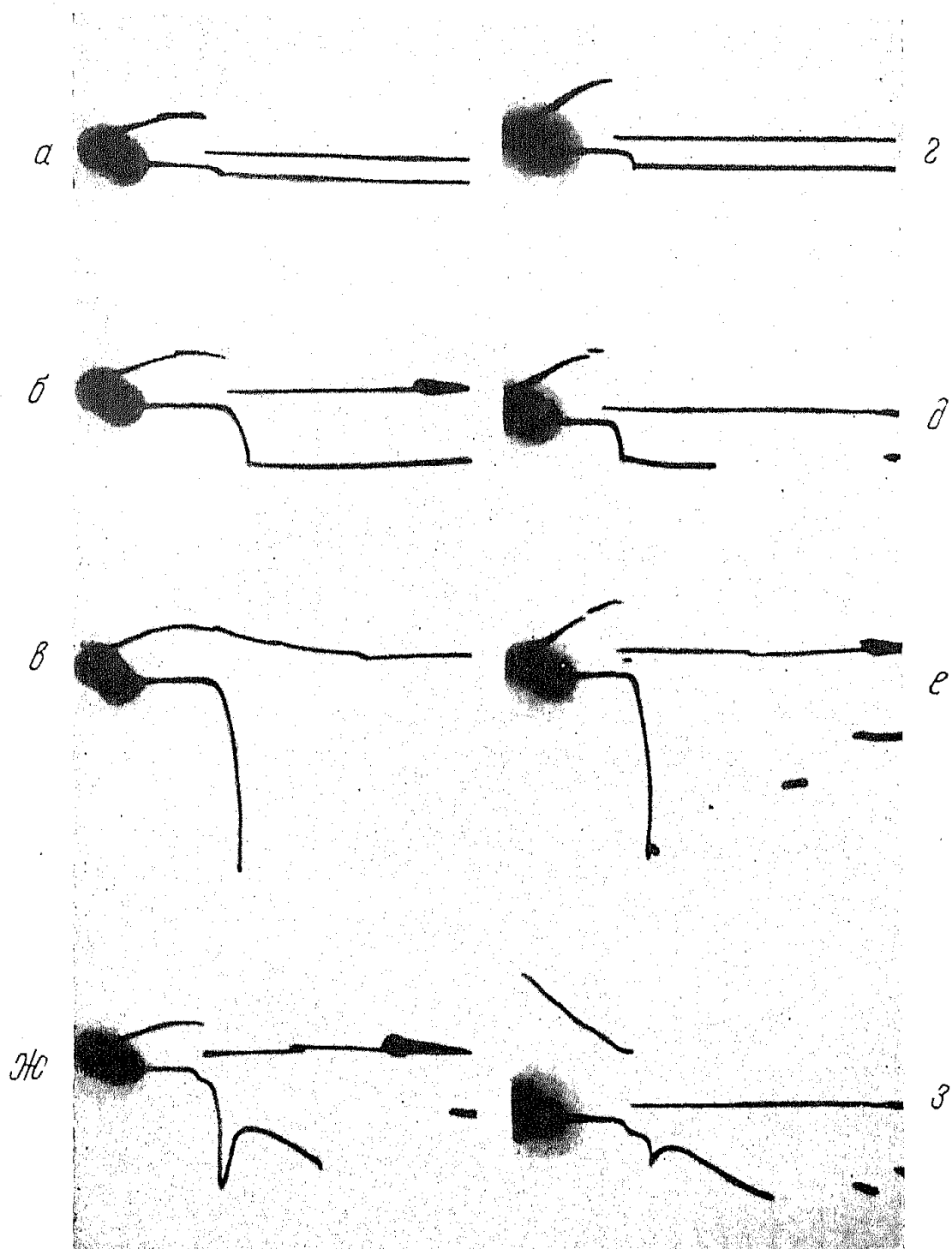


Рис. 4. Осциллограммы, полученные с вольфрамовой проволокой диаметром 0,1 мм: а — 60 В/см; в — $6,2 \cdot 10^{-4}$ сек/см. Нижние линии $V_{\text{ка}}(t)$, верхние линии $V_{\text{ан}}(t)$ (рис. а — $i_{\text{ка}}$) и $V_{\text{ан}}(t)$ (рис. в). Кривые а, б, в — $\rho_{\text{ка}} = 10^3 \Omega$; $V_+ = 700$ В; $j(t_0) = 9 \cdot 10^5$ А/см²; $l = 1$ см; кривые г, д, е — $\rho_{\text{ка}} = 10^2 \Omega$; $V_+ = 700$ В; $j(t_0) = 10^6$ А/см²; $l = 1$ см; кривые ж, з — $\rho_{\text{ка}} = 10^2 \Omega$; $V_+ = 700$ В; $j(t_0) = 10^6$ А/см²; $l = 0,5$ см. Верхняя кривая смещена относительно нижней на 0,25 см влево. Нулевые линии осциллограмм а — в — параллельные прямые, проходящие через горизонтальный отрезок верхних кривых а, б, г, д, в и через горизонтальный отрезок в начале всех нижних кривых рис. 4 (натуральная величина)

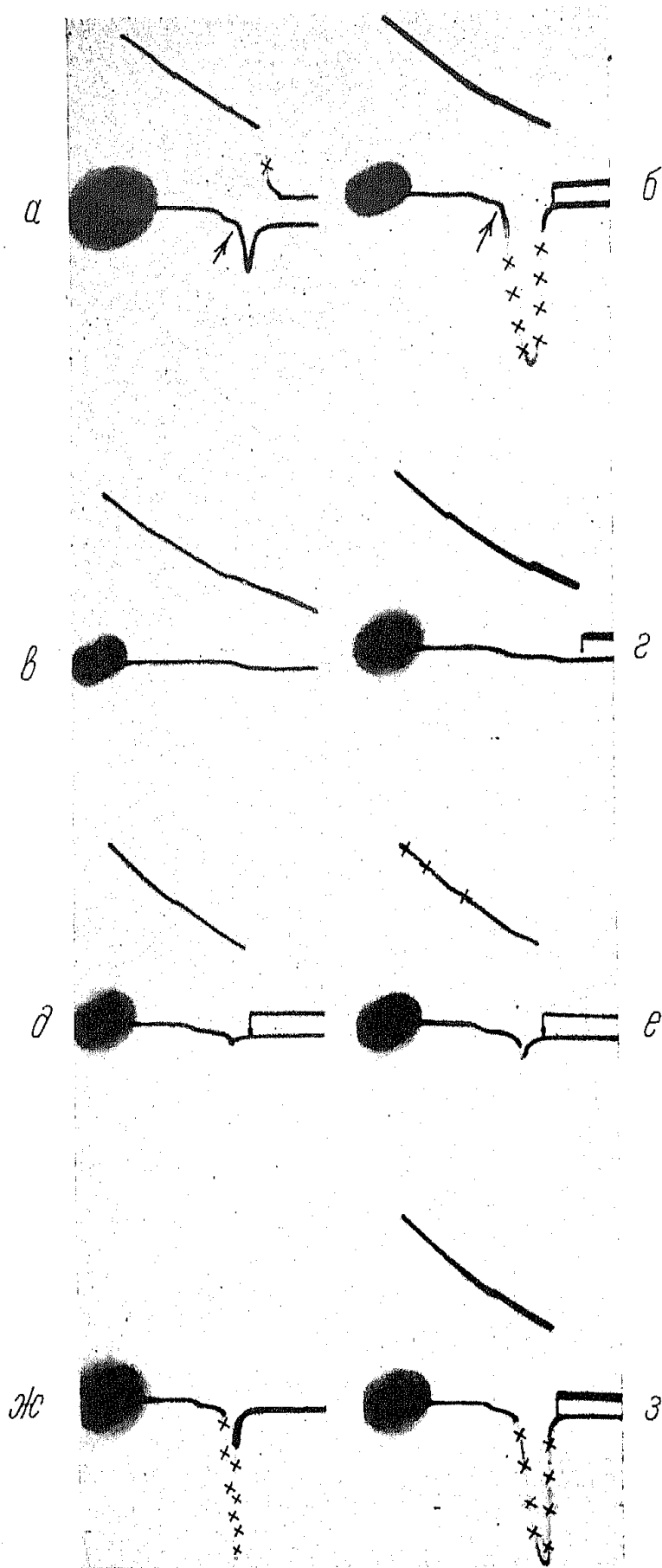


Рис. 6. Осциллограммы, полученные с вольфрамовой проволокой диаметром 0,1 мм, $l=0,5$ см. Верхние линии $V_r(t)$; нижние линии $V_{\rho a}(t)$; $r=2 \Omega$, $\rho_a=500 \Omega$, $V_+=200$ В, $a=60$ В/см, $\epsilon=6,2 \cdot 10^{-4}$ сек/см. Верхняя кривая смещена относительно нижней на 0,25 см вправо. Нулевые линии осциллограмм рис. 6 проходят так же, как нулевые линии осциллограмм рис. 4

снятым при $V_+ = 700$ В, в случае нагревания нити импульсами тока $i(t)$ видно, что по мере увеличения продолжительности импульса тока i ток I_a растет, не ограничиваясь величиной $I_a^* = 0,055$ А. По осциллограммам рис. 4, а, б, в находим соответственно $I_a = 0,0036$ А, $I_a = 0,042$ А и $I_a > 0,13$ А. На рис. 4, з, д, е приведены осциллограммы $V_{pa}(t)$, полученные при импульсах различной длительности для той же лампы при несколько увеличенной силе тока i . В опытах 4, г, д, е отношение I_a/I_a^* достигает соответственно 1,8; 5,4 и 24. Масштаб осциллограмм $V_{pa}(t)$ 4, з — е по оси ординат уменьшен по сравнению с осциллограммами 4, а — в в 10 раз путем уменьшения ρ .

Очень сильные изменения анодного тока I_a при изменении импульса тока $i(t)$ наблюдаются и в других режимах нагревания нити. Например, в опытах 3, д и е начальное напряжение V_0 на конденсаторах цепочки (рис. 2) различается на величину $\approx 1\%$, тогда как в опыте 3, д $I_a(t_1) = 21I_a^*$, а в опыте 3, е $I_a(t_1) = 63I_a^*$. При уменьшении V_0 в опытах 3, б и в на величину $\sim 5\%$ ток I_a падает от $360I_a^*$ и $570I_a^*$ приблизительно до I_a^* и при данной чувствительности записи становится незаметным (осциллограмма $V_{pa}(t)$ совпадает с нулевой линией, показанной на рис. 3, а).

Из приведенных примеров видно, что отношение I_a/I_a^* возрастает при увеличении продолжительности и плотности тока импульса, нагревающего нить, не только при $I_a < I_a^*$, но также и при $I_a > I_a^*$. Следовательно, и при $I_a > I_a^*$ величина I_a изменяется вследствие изменения состояния нити под действием тока i , подобно тому, как это всегда происходит при $I_a < I_a^*$.

Заметим, что осциллограммы рис. 4, д и е позволяют видеть характер изменения I_a при появлении в лампе малых порций газа. Опыты 4, д и е проводились при плохо обезгаженном аноде, вследствие чего при возросшем анодном токе выделялся газ. В момент появления газа ток I_a очень резко возрастает, и линия $V_{pa}(t)$ выходит из поля зрения (разрыв линии на горизонтальном участке осциллограммы рис. 4, д). По осциллограмме рис. 4, д видно, что изменение анодного тока, вызванное вспышкой разряда, при данной скорости развертки выглядит скачкообразным, тогда как интересующее нас нарастание I_a , связанное с протеканием тока $i(t)$, происходит более плавно. Ступенчатый вид осциллограммы $V_{pa}(t)$ рис. 4, е объясняется падением напряжения V_+ на конденсаторе C_+ (рис. 2). Действительно, когда разряда в лампе не происходит, ток I_a не превышает 1,35 А. При таком токе конденсатор C_+ разряжается медленно и линия $V_{pa}(t)$ идет почти параллельно оси абсцисс. Во время вспышки разряда ток I_a возрастает до величины $\sim V_+/ \rho_a$ (7А для начала первой вспышки). К моменту, когда этот разряд гаснет, сильный ток I_a успевает заметно разрядить конденсатор C_+ . При исчезновении разряда ток I_a скачком принимает новое значение, соответствующее новому значению V_+ .

4. Оценка величины I_a/I_a^* при напряжении $V_+ = 6$ В

Оценка величины I_a/I_a^* при $V_a \leq 6$ В представляет интерес потому, что возникновение ионов за счет анодного поля при таких V_a невозможно. Эти опыты производились с той же лампой, что и опыты, описанные в разделах 1 и 2, но прежний коллектор ионов⁶ теперь соеди-

⁶ В этих опытах ток I_n не измерялся, так как при малых V_+ включение на коллектор ионов большого отрицательного напряжения V_- практически совсем запирает анодный ток (см. раздел 1).

нялся с анодом. В остальных условиях рассматриваемых опытов отличались от опытов 3, б — г только величиной V_+ и способом регистрации анодного тока. Принципиальная схема устройства, при помощи которого производилась оценка величины анодного тока, приведена на рис. 5. При протекании по нити R импульса тока $i(t)$ возникающий импульс анодного тока I_a создавал падение напряжения на сопротивлении ρ_1 . Через усилительную лампу это падение напряжения фиксировалось осциллографом по изменению падения напряжения $V_p(t)$ на сопротивлении $\rho = 10^5 \Omega$.

По осциллограммам $V_p(t)$ при помощи градуировочной кривой усилителя оценивалась величина тока I_a . Импульсы тока $i(t)$ оставались такими же, как в опытах 3, б — г, когда наблюдалась аномально большая величина анодного тока.

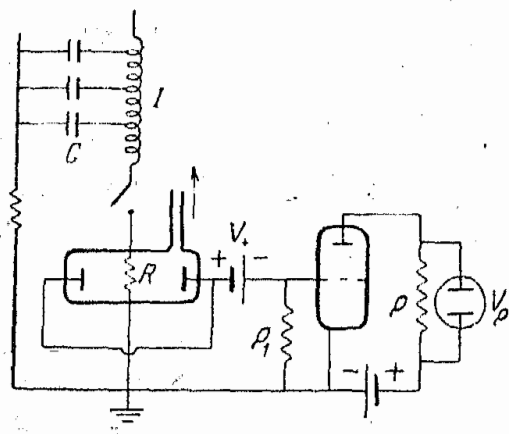


Рис. 5. Схема установки для измерения I_a при малом анодном напряжении. R — нить, $V_+ = 6 \text{ V}$, $\rho_1 = 900 \Omega$, $\rho = 10^5 \Omega$, I — источник импульсов тока i

В рассматриваемых опытах, так же как в опытах 3, б — г, напряжение V_0 на конденсаторах цепочки, создающей импульсы $i(t)$, было равно $5,1 \text{ kV}$. Анодный ток, измеренный при этих импульсах, достигал величины $I_a \approx 10^{-3} \text{ A}$. Кроме того, были сняты осциллограммы при меньших значениях V_0 ($V_0 = 4,8 \text{ kV}$), при которых в прежних опытах не наблюдалось аномалий анодного тока (рис. 3, а). В рассматриваемых опытах при $V_0 = 4,8 \text{ kV}$ величина анодного тока оказалась настолько малой, что не могла быть измерена

по осциллограммам (т. е., по крайней мере, в 20—30 раз меньшей, чем в опытах при $V_0 = 5,1 \text{ kV}$).

При стационарном накале нити измерение анодного тока I_a^* производилось при помощи того же усилителя, но напряжение на сопротивлении ρ регистрировалось не осциллографом, а электростатическим вольтметром. Кроме того, производилось измерение анодного тока в той же лампе при $V_+ = 275 \text{ V}$ без усилителя, и полученный результат пересчитывался по закону Богуславского — Лэнгмюра на анодное напряжение 6 V . В обоих случаях получился практически совпадающий результат: $I_a^* \approx 10^{-5} \text{ A}$.

Из сопоставления величин I_a и I_a^* видно, что при $V_+ = 6 \text{ V}$ отношение I_a/I_a^* оказывается того же порядка величины, как в опытах 3, б — г при $V_+ = 400 \text{ V}$. При уменьшении напряжения V_0 на конденсаторах цепочки на величину 5—6% аномалии анодного тока пропадают так же, как это наблюдалось в опытах 3, а — г. Из сопоставления порядка величин тока I_a в опытах с $V_+ = 6 \text{ V}$ и в опытах с $V_+ = 400 \text{ V}$ ясно, что величина анодного тока⁷ зависит от анодного напряжения $V_a = V_+ - \rho_a I_a$. (См. также описание осциллограммы 4, е в конце раздела 3.) Следовательно, в случае нагревания нити импульсом тока большой плотности влияние пространственного заряда на анодный ток сохраняется. Однако, в отличие от случая стационарного накала нити, величина анодного тока, ограниченного пространственным зарядом, сильно зависит от состояния нити (ток I_a сильно нарастает при дальнейшем нагревании нити током i).

⁷ В опытах с $V_0 = 5,1 \text{ kV}$ при $V_+ = 6 \text{ V}$ на обоих анодах $I_a \approx 10^{-3} \text{ A}$. При таком же V_0 , но при $V_- = -1800 \text{ V}$ на коллекторе ионов и при $V_+ = 400 \text{ V}$ на одном аноде $I_a \approx 0,4 \text{ A}$ (рис. 3, е).

5. Соблюдение закона Богуславского — Лэнгмюра в начальной стадии процесса нарастания анодного тока

Результаты экспериментов, рассмотренных выше, показывают, что аномально большая величина анодного тока определяется состоянием самой нити, а не вызвана нейтрализацией пространственного заряда ионами. Если это верно, то состояние вольфрама в рассматриваемых опытах должно быть аномальным. Действительно, в обычных условиях нагревания вольфрамовых катодов до температуры плавления подобных явлений не наблюдается. Таким образом изучение отклонения анодного тока, ограниченного пространственным зарядом, от нормального значения I_a^* приводит к тому же выводу об аномальном состоянии металла, к которому мы пришли ранее [1], наблюдая анодный ток, превышающий обычную величину тока насыщения при температуре плавления проволоки.

Поскольку в аномальном состоянии вольфрам дает электронную эмиссию, во много раз превышающую нормальную эмиссию при температуре плавления, естественно предположить, что большая величина эмиссии и является причиной нарушения закона Богуславского — Лэнгмюра.

Предположим, что при эмиссии I , превышающей некоторое значение $\bar{I}$, пространственный заряд уже не может ограничивать силу анодного тока обычной величиной I_a^* . Если причина аномалий анодного тока действительно заключается в этом, то в течение времени, когда в процессе нарастания эмиссии $I(t)$ будет выполнено условие $I_a^* < I < \bar{I}$, анодный ток должен оставаться постоянным и равным I_a^* . Следовательно, осциллограмма $V_{pa}(t)$ перед началом необычного возрастания I_a должна зарегистрировать площадку, высота которой определяется законом Богуславского — Лэнгмюра. При неизменных параметрах цепи тока i ввиду того, что эмиссия I определяется состоянием материала нити, можно написать $I = I(V_0, t)$, где V_0 — начальное напряжение на конденсаторе C или на конденсаторах цепочки (рис. 2). В случае увеличения V_0 при неизменных прочих условиях опыта длительность (протяженность по оси абсцисс) упомянутой площадки на осциллограмме $V_{pa}(t)$ должна сокращаться благодаря увеличению скорости нарастания $I(V_0, t)$. Высота площадки при увеличении V_0 должна оставаться неизменной и равной I_a^* . Увеличение продолжительности импульса тока $i(t)$ должно привести к увеличению максимального значения I_a/I_a^* , так как согласно нашему предположению анодный ток продолжает нарастать при нарастании эмиссии.

Обратимся к экспериментальным данным. На осциллограммах анодного тока, приведенных, например, на рис. 4, $a - e$, незаметно площадки, обладающей такими свойствами. Однако, поскольку влияние пространственного заряда на I_a не устраняется полностью, для наблюдения площадки необходимо равноправие всех участков нити, о чем до сих пор мы не заботились. Если поле около различных участков нити не одинаково, то эти участки дадут площадки различной высоты, которые при записи суммарного анодного тока будут незаметны.

В описываемых ниже опытах использовалась лампа с вольфрамовой нитью, анодное поле вдоль которой было более равномерным, чем при прежних измерениях. Большая равномерность поля была достигнута путем увеличения размера анодных пластинок и уменьшения длины нити до 0,5 см. Нить нагревалась приблизительно таким же током $i(t)$, как в опытах 4, $г - e$; полученные осциллограммы $V_{pa}(t)$ приведены на рис. 6, a и $б$, где интересующая нас площадка отмечена

стрелкой. Различная величина превышения I_a над площадкой на осциллограммах a и b рис. 6 (вклейка) объясняется различной продолжительностью импульса тока $i(t)$. Это ясно из того, что в момент выключения тока i нарастание анодного тока прекращается. [Осциллограммы $V_r(t) = ri(t)$ приведены над осциллограммами $V_{ea}(t) = \rho_a I_a(t)$; кривые $V_r(t)$ смещены относительно кривых $V_{ea}(t)$ на 0,25 см вправо.]

На рис. 6, b — з приведена серия осциллограмм $V_{ea}(t)$, показывающая, что длительность площадки может быть весьма различной. Условия опытов при съемке осциллограмм рис. 6, b — з различались увеличением V_0 при одновременном уменьшении длительности импульса тока i (в опытах 6, ж и з ток i выключен с запозданием, в результате чего ток I_a успел сильно вырасти под площадкой). В табл. 3 приведены результаты измерения по осциллограммам рис. 6, b — з величины $V_r(t_0) = ri(t_0)$ и соответствующей длительности площадки Δt (в условных единицах).

Таблица 3

Рис. 6	$V_r(t_0)$ (мм)	Δt (мм)	Рис. 6	$V_r(t_0)$ (мм)	Δt (мм)
b	19,6	Выброса нет	e	22,5	3,1—3,8
z	21,0	5,5	$ж$	—	2,75
$д$	22,5	3,8	$з$	23,0	2,4

На рис. 7 точками представлены результаты измерения $V_r(t_0)$ и Δt для другой подобной серии опытов, сделанных с другой такой же нитью. Как видно по осциллограммам рис. 6, эти измерения весьма неточны. Однако они несомненно показывают, что длительность площадки уменьшается с ростом V_0 . По этим осциллограммам видно

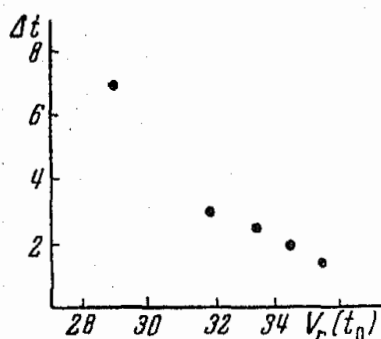


Рис. 7. Результаты измерения $V_r(t_0)$ и Δt по осциллограммам в условных единицах (0,69 мм)

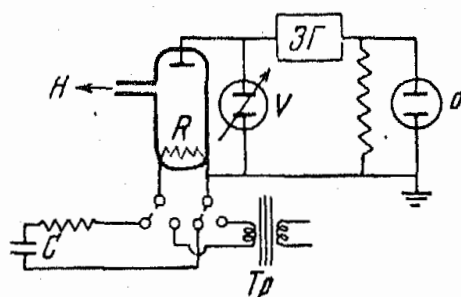


Рис. 8. R — нить, O — осциллограф, V — вольтметр, H — насос, Tr — трансформатор стационарного накала; C — источник тока $i(t)$. Период колебаний анодного напряжения, создаваемого генератором, $\tau = 2,5 \cdot 10^{-4}$ сек.

также, что высота площадки не зависит от V_0 . Правда, площадка получается несколько наклонной, что, повидимому, вызвано неодинаковой величиной анодного поля около разных участков нити.

При измерении силы анодного тока, соответствующего площадке, в целях получения более равномерного анодного поля длина нити была сокращена до 2,5 мм. Поскольку высота площадки не меняется при изменении V_0 , эти измерения можно было производить при несколько уменьшенных V_0 , при которых площадки получались более длительными. В качестве источника анодного напряжения использовался генератор звуковой частоты. В те моменты, когда на анод по-

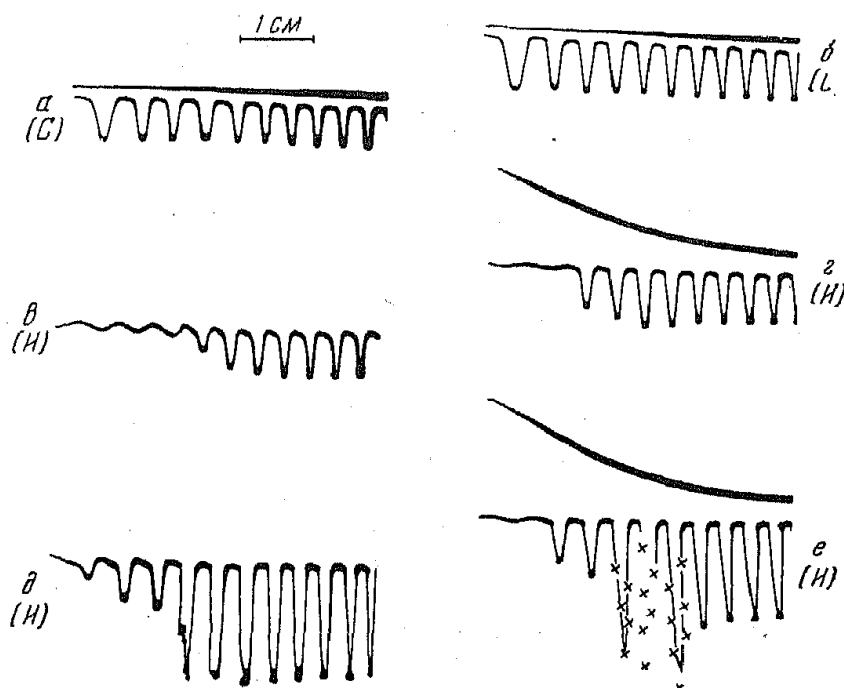


Рис. 9. Осциллограммы, полученные с вольфрамовой проволокой диаметром 0,1 мм; $l = 2,5$ мм, C — стационарный накал, I — импульсный накал. Вверху $V_r(t)$, внизу $V_{pa}(t)$. $r = 2 \Omega$; $\rho = 14 \cdot 10^3 \Omega$. В опытах $д$ и $е$ l больше, чем в опытах $в$ и $г$. Кривые $а$, $в$, $д$ сняты при $V_+ = 212$ В, а кривые $б$, $г$, $е$ — при $V_+ = 283$ В, $a = 77$ В/см. Масштаб времени виден по периоду колебаний анодного напряжения $\tau = 2,5 \cdot 10^{-4}$ сек.

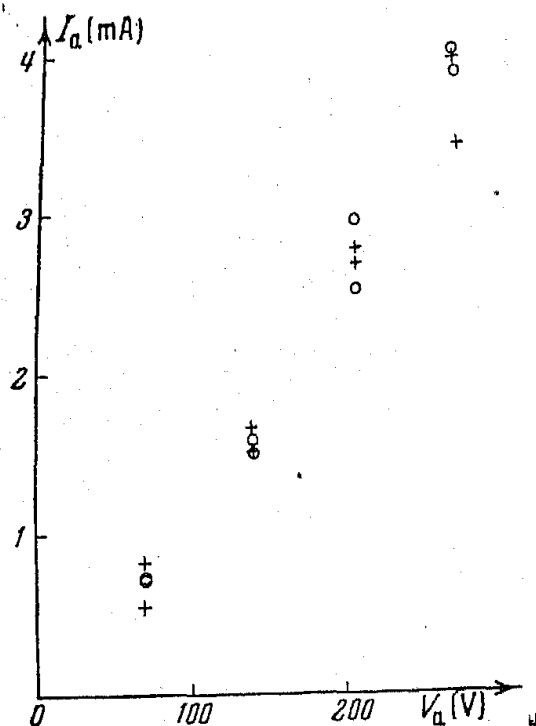


Рис. 10. Результаты измерения анодного тока: светлые кружки — анодный ток при стационарном накале нити, крестики — анодный ток, соответствующий площадке при нагревании нити импульсом тока i

падало отрицательное напряжение, луч осциллографа возвращался на нулевую линию, что облегчало измерения. Опыты производились с одной и той же нитью попеременно при стационарном и импульсном накале по схемам, показанным на рис. 8. Некоторые из полученных осциллограмм приведены на рис. 9. Измерения по осциллограммам показывают, что в пределах точности опыта анодный ток, соответствующий площадке, равен току I_a^* , который получается при очень сильном стационарном накале нити (рис. 10).

6. Влияние вторичных токов на вид осциллограмм $V_{pa}(t)$

При сравнении между собой осциллограмм $V_{pa}(t)$, полученных при почти одинаковых импульсах тока $i(t)$ в опытах 4, г — е и 6, а, б, обнаруживается существенное различие зависимости I_a от времени: в опытах 4, г — е аномально большой анодный ток не убывает в течение значительно большего времени после выключения тока i , чем в опытах 6, а и б. Это различие, по нашему мнению, объясняется следующим образом. В опытах 4, г — е поле около различных участков нити и анода весьма различно. Поэтому при большом анодном токе плотность этого тока в отдельных местах на поверхности электродов оказывается достаточной для появления вторичного тока, способного поддерживать уже возникший ток.

Для проверки такого объяснения опыты 4, г — е были повторены в условиях, обеспечивающих получение более равномерного распределения плотности тока по поверхности электродов. Для этого нить более тщательно, чем прежде, устанавливалась параллельно плоскости анода, и ее длина была уменьшена от 1 до 0,5 см. Осциллограммы $V_{pa}(t)$, полученные после этих изменений, приведены на рис. 4, ж и з. Из сопоставления осциллограмм рис. 4, ж, з с осциллограммами рис. 4, г — е можно заключить, что при переходе к более равномерному полю на осциллограмме $V_{pa}(t)$ одновременно появляется и площадка, соответствующая закону Богуславского — Лэнгмюра, и спадающая ветвь. Медленное увеличение тока I_a после его падения, хорошо заметное на рис. 4, ж и з, является результатом воздействия самого тока I_a на электроды. Действительно, ток i в это время уже выключен, а вспышка заряда в лампе приводит к гораздо более быстрым и сильным изменениям тока I_a [таковы, например, разрывы линий $V_{pa}(t)$ на рис. 4, д, е, ж, з]. Нарастание тока I_a под действием самого тока I_a , очевидно, и свидетельствует о нарастании вторичных токов. При уменьшении V_+ в опытах 4, ж, з от 700 до 400 В нарастания анодного тока после выключения тока i не наблюдалось, и осциллограммы имели такой же вид, как осциллограммы рис. 6, а и б. Итак, опыт показывает, что после выключения тока i величина анодного тока может сильно зависеть от вторичных токов (которые появляются, повидимому, в связи с разогреванием отдельных участков электродов).

Характерно, что влияние вторичных токов значительно именно в опытах 4, г — е, в которых V_+ велико и анодное поле неравномерно. В других опытах (например, 3, б) вторичные токи малы и не дают роста I_a после выключения тока i . Слабый ток I_n в опытах 3, б, в, вероятно, является вторичным током того же происхождения. Этот ток плавно нарастает⁸ во время протекания аномального тока I_a и начинает спадать сразу после быстрого перехода тока I_a к нормальному

⁸ Скачки анодного тока, наблюдаемые в опыте 3, в при $t_1 < t < t_2$ и отмеченные на осциллограмме $V_{pa}(t)$ крестиками, повидимому, вызваны выделением газа из электродов (ст. раздел 3). Таких скачков не наблюдается в опытах 3, б, д, е, в которых анодный ток меньше, чем в опыте 3, в.

значению. Спадание тока I_a происходит медленно, повидимому, потому, что оно определяется возвращением электродов к тому состоянию, из которого они были выведены в результате протекания аномально большого анодного тока. Медленное нарастание тока I_a в промежутке времени $t_2 - t_1$, вероятно, является результатом частичной нейтрализации пространственного заряда ионами, число которых в это время возрастает.

Вопрос о вторичных токах рассматривается нами лишь постольку, поскольку эти токи могут быть помехой при изучении анодного тока, возникающего в результате протекания по нити тока i . Как видно из рис. 4, *ж*, 3, возрастание I_a после выключения тока i происходит медленно по сравнению с ростом I_a во время протекания тока i . Следовательно, вторичные токи не могут существенным образом повлиять на нарастание I_a при протекании тока i . Кроме того, сам факт спада I_a в то время, когда нить еще не могла заметно остыть и когда ток I_a велик, свидетельствует о том, что вторичные токи не могли вызвать аномального роста I_a .

Выводы

1. При нагревании вольфрамового катода вакуумной лампы импульсом тока $\sim 3,4 \cdot 10^6$ А/см² появляется импульс анодного тока I_a , который в сотни раз превышает обычную величину анодного тока I_a^* , ограниченного пространственным зарядом. При нагревании катода импульсом тока $\sim 10^5$ А/см² наблюдался ток I_a , превышающий I_a^* только в десятки раз⁹.

2. При уменьшении анодного напряжения наряду с величиной I_a^* уменьшается и аномально большой ток I_a .

3. Величина $I_a/I_a^* \approx 10^2$ наблюдается как при анодном напряжении V_a порядка сотен вольт, так и при $V_a \sim 5-6$ В, когда возникновение ионов в лампе за счет анодного поля невозможно.

4. Аномально большая величина тока I_a наблюдается в течение времени $\sim 10^{-5}$ сек. после момента выключения тока i , нагревающего катод¹⁰.

5. Большая величина тока I_a по сравнению с I_a^* не может быть объяснена нейтрализацией пространственного заряда электронами ионами (аномально большой ток I_a появляется при меньшем числе ионов в лампе, а уменьшается до величины $\sim I_a^*$ при большем числе ионов).

6. Нарастание тока I_a определяется изменением состояния катода в результате протекания по нему тока i . В момент выключения тока i нарастание тока I_a прекращается.

7. Нарастанию анодного тока сверх значения I_a^* предшествует область, в которой во время нагревания катода током i анодный ток остается почти неизменным и равным I_a^* (область соблюдения закона Богуславского — Лэнгмюра). Нарастание I_a сверх I_a^* (т. е. нарушение закона Богуславского — Лэнгмюра) при дальнейшем нагревании катода обусловлено, по нашему мнению, очень сильным возрастанием эмиссии из катода, которая достигает очень большой величины. Действительно, согласно результатам опытов [1], в случае нагревания вольфрамового катода импульсом тока большой плотности анодный ток может в 100 раз превышать обычную эмиссию данного катода при темпера-

⁹ Не доказано, что при $j \approx 10^5$ А/см² нельзя получить такого же анодного тока ($I_a \approx 10^2 I_a^*$), как при $j \approx 3,4 \cdot 10^6$ А/см².

¹⁰ При отсутствии заметных вторичных токов.

туре плавления $I_{\text{пл}}$. Сильная зависимость величины аномального тока I_a от V_a , обнаруженная в настоящей работе, позволяет заключить, что измеренный в [1] ток $I_a \approx 100 I_{\text{пл}}$ еще не является током насыщения катода. Следовательно, при нагревании вольфрама током большой плотности эмиссия может превышать величину $100 I_{\text{пл}} \approx 5 \cdot 10^4 \text{ А/см}^2$.

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

Поступила в редакцию
13 июля 1953 г.

Литература

[1] С. В. Лебедев и С. Э. Хайкин. ЖЭТФ, 26, 723, 1954.— [2] С. Дэшман. Научные основы вакуумной техники, ГИИЛ, М., 1950, стр. 555.

ДИСКУССИИ

О ТЕОРИИ АВТОГЕНЕЗИСА Н. С. АКУЛОВА

В. И. Скобелкин

В настоящей статье дается критика физико-химических представлений Н. С. Акулова об активных молекулах конечного продукта, положенных им в основу автогенезиса, а также устанавливается математическая ошибочность вывода уравнения автогенезиса.

Теория автогенезиса Н. С. Акулова имеет свою историю. Поэтому, прежде чем перейти к критике теории автогенезиса, напомним кратко ее содержание. Первый вариант этой теории опубликован в 1940 г. в книге «Основы химической динамики», второй, усовершенствованный вариант автогенезиса опубликован в 1951 г. в книге «Теория цепных процессов», в которой дается также физико-химическое обоснование первого варианта, построенного чисто формально. В обоих вариантах теория автогенезиса сводится к выводу уравнения кинетики химических реакций и исследованию его свойств.

1. Первый вариант автогенезиса 1940 г. [1]

Сущность закона автогенезиса по Акулову состоит в том, что в отличие от закона действующих масс, скорость реакции зависит явно от времени и определяется уравнением:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\alpha(1-\alpha)}{\tau - t(1-\alpha)}, \quad (1)$$

где α — относительное количество уже прореагировавшего вещества по отношению к максимально возможному его количеству, τ — период индукции.

Уравнение (1) предназначено для объяснения скачкообразного нарастания скорости реакции и определения периода индукции. Вот как сам Акулов определяет значение уравнения (1).

На стр. 19 [1] читаем:

«Этот закон позволяет сделать прежде всего следующие исключительные важные выводы о «скачкообразном» развитии процесса химического превращения вещества. В начальный момент, когда реагенты приведены в соприкосновение (нестабильное состояние системы), количество продуктов реакции еще равно нулю: $\alpha = 0$. Тогда и скорость реакции, согласно (II) (формула (1). — В. С.), равна нулю, т. е. реакция не идет. Мы получаем, таким образом, неустойчивое или ложное равновесие системы. Это условие не будет нарушаться и с течением времени, однако лишь до тех пор, пока t не достигнет момента, равного τ : $t = \tau$. В этот критический момент времени знаменатель в (II) стремится к нулю и скорость реакции $\frac{d\alpha}{dt}$ скачком получает конечное значение. Действительно, полу-

чающаяся неопределенность легко раскрывается и дает, [как мы увидим далее,

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_{t=\tau} = \frac{2}{\tau}. \quad (15)$$

Таким образом мы получаем эффект самовозбуждения реакции; τ при этом есть период ложного равновесия системы.

Уравнение (1) имеет лишь одно решение, удовлетворяющее начальному условию $\alpha = 0$ при $t = 0$. Это решение, кроме того, тождественно обращается в нуль для всех t и соответствует отсутствию какой бы то ни было реакции. Второе решение, которое приводит Акулов (стр. 19 [1], формула (III)), имеет вид

$$\frac{t}{\tau} = -\frac{1}{\alpha} \ln(1 - \alpha). \quad (2)$$

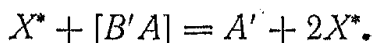
Это решение дает $\alpha = 0$ при $t = \tau$, отрицательные α при $t < \tau$ и $\alpha = -\infty$ при $t = 0$. Отсюда следует, что второе решение в интервале $0 \leq t < \tau$ не имеет физического смысла. По Акулову реакция сначала идет по прямой $\alpha = 0$, соответствующей отсутствию реакции, а затем при достижении $t = \tau$ переходит на кривую, определяемую уравнением (2). Математически очевидно, что в точке пересечения двух различных кривых касательные к ним, т. е. da/dt , терпят разрыв, но это не может иметь какое-либо отношение к физике явления, так как новое явление в момент $t = \tau$ не может возникнуть из ничего, если до этого момента реакция отсутствовала. Таким образом скачок скорости реакции в первом варианте автогенезиса обусловлен чисто математическим построением и не имеет физического содержания.

2. Второй вариант автогенезиса 1951 г. [2]

Чтобы оправдать формальные операции с уравнением (1) и получить скачок скорости реакции (15), Акулов привлекает к рассмотрению так называемые активные молекулы конечного продукта реакции и вводит понятие «обратной связи».

Вот как Акулов определяет роль таких активных молекул. На стр. 77 [2] читаем:

«Рассмотрим теперь следующий механизм действия конечного активного продукта X^* на продукт B' . Пусть, соударяясь с молекулами исходного продукта A , молекулы B' образуют сначала активные комплексы $[B'A]$, которые при столкновении с обладающими избытком энергии молекулами конечного продукта X^* распадаются и дают продукты A' и X . Мы имеем тогда¹:



Покажем, что такого рода обратные взаимодействия процесса развития цепи на первичный процесс ее инициирования действительно приводят к появлению скачка скорости в конце весьма медленной реакции (разрядка наша. — В. С.), идущей в периоде индукции.

Прежде всего мы должны учесть, что энергетически насыщенные молекулы конечного продукта могут сохранять свою энергию лишь весьма непродолжительное время. Обозначим это время через θ . Тогда к моменту t сохраняют свою энергию только те молекулы, которые образовались после момента $t - \theta$. Все остальные молекулы к моменту

¹ A' — активный промежуточный продукт, B' — малоактивный промежуточный продукт (В. С.).

t успевают дезактивироваться. Таким образом, для количества активных молекул конечного продукта X^* к моменту t будем иметь:

$$X^* = \int_{t=0}^t \frac{dx^*}{dt} dt. \quad (13,3)$$

... Так как число неустойчивых комплексов пропорционально числу встреч между молекулами B' и A , то для дополнительной скорости получения конечного продукта за счет действия X^* на комплексы $[B'A]$ будем иметь:

$$\left(\frac{dx^*}{dt}\right)_g = g_0 X^* [B'] [A]. \quad (13,7)»$$

Формула (13,7) дает, по Акулову, скорость реакции, соответствующую автогенезису. Общая скорость реакции, учитывающая автокатализ и автогенезис при наличии выгорания исходных продуктов, дается следующей формулой [в книге ^[2] см. формулу (13,23)]:

$$\frac{dx}{dt} = \left(k [A']_0 + kx + gt \frac{dx}{dt}\right) ([A]_0 - x). \quad (3)$$

В уравнении (3) $g = g_0 b'_0 \theta$, k — константа автокатализа, $[A]_0$ — концентрация исходного продукта, $[A']_0$ — начальная затравка промежуточного продукта A' . Уравнение кинетики (3) Акулов получает, полагая $[B'] = b'_0 t$, а вместо (13,3)

$$X = \frac{dx}{dt} \theta.$$

Вводя безразмерные переменные $\alpha = \frac{x}{[A]_0}$ и $\epsilon_0 = \frac{[A']_0}{[A]_0}$ и полагая $k \approx g$, Акулов переписывает уравнение (3) в виде

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{(\epsilon_0 + \alpha)(1 - \alpha)}{\tau - t(1 - \alpha)}, \quad (4)$$

где $\tau = \frac{1}{k[A]_0}$.

Интегрирование уравнения (4) при начальных условиях $\alpha = 0$ при $t = 0$ дает

$$\frac{t}{\tau} = -\frac{\ln(1 - \alpha)}{\epsilon_0 + \alpha}. \quad (5)$$

Какие же выводы делает из формулы (5) Акулов? На стр. 83 ^[2] читаем:

«...определяя отсюда [т. е. из формул (3) и (4).—В. С.] $\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_{t \rightarrow \tau}$, легко найдем, что при переходе через $t = \tau$ при весьма малых ϵ_0 имеет место «вспышка», т. е. прирост скорости, равный²

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_{t \rightarrow \tau} = \frac{2}{\tau}. \quad (13,28)»$$

Далее читаем:

«Сопоставление кривых Бона и Хилла для окисления этана с теоретическими кривыми, рассчитанными ... при $\epsilon_0 \rightarrow 0$, показывает прекрасное согласие теории с опытом. В этом случае весь ход каждой

² В действительности при $\epsilon_0 > 0$ в момент $t = \tau$ скорость реакции будет порядка $1/\tau$ и быстро нарастает, принимая значение $2/\tau$ при некотором $t^* > \tau$. Однако при $\epsilon_0 \rightarrow 0$, $t^* \rightarrow \tau + 0$, так что неточность, допущенная Н. С. Акуловым, несущественна (В. С.).

кривой определяется величиной времени задержки τ . Как мы видим, имеет место количественное согласие с опытом».

В сноске к этой странице указывается, что в части I книги Н. С. Акулова «Основы химической динамики» рассматривается формула (5) для случая $\lim \epsilon_0 = 0$, т. е. для исчезающе малого ϵ_0 .

Легко видеть, что уравнение кинетики нового варианта автогенезиса (4) отличается от уравнения (1) варианта 1940 г. малой затравкой промежуточного активного продукта ϵ_0 . Введение этой затравки потребовалось для того, чтобы решение уравнения нового варианта автогенезиса было единственным и имело физический смысл для $t < \tau$. Действительно, если $\epsilon_0 > 0$, то выполняются начальные условия $\alpha = 0$ при $t = 0$ и α во всем интервале времени $0 < t \leq \tau$ имеет положительное значение. Однако и в этом случае скачок скорости реакции обусловлен внутренней неустойчивостью системы по отношению к бесконечно малой затравке ϵ_0 .

3. Ошибочность вывода уравнения автогенезиса и бессодержательность представлений об активных молекулах конечного продукта

При выводе уравнения автогенезиса (3) Акулов [2], считая, что время жизни молекул θ достаточно мало, вместо точного соотношения (13,3) пишет

$$X^* = \frac{dx}{dt} \theta, \quad (6)$$

где dx/dt берется в момент t .

Замена уравнения (13,3) уравнением (6) допустима при малых θ лишь в том случае, если производные dx/dt меняются всюду равномерно. Но там, где эта производная может меняться резко, как это получается, например, в теории Акулова в окрестности $t = \tau$, замена выражения (13,3) выражением (6) совершенно недопустима. Чтобы доказать это, исследуем уравнение кинетики Акулова, не делая замены (6), а рассматривая точное соотношение (13,3)

$$X = x(t) - x(t - \theta) = \int_{t-\theta}^t \frac{dx}{dt} dt.$$

В этом случае

$$\frac{dx}{dt} = (k[A']_0 + kx + g_0 b'_0 t [x(t) - x(t - \theta)]) ([A]_0 - x). \quad (7)$$

Уравнение (7), которое является уравнением с запаздывающим аргументом, не содержит особых точек, в то время как замена разности $X = x(t) - x(t - \theta)$ выражением (13,3) создает особые точки, определяемые из соотношения

$$1 - g_0 t ([A]_0 - x) = 0,$$

причем тип уравнения существенно изменяется. Ниже будет доказана теорема единственности, согласно которой существует только одно решение x уравнения (7), обращающееся в $x = x_0 = 0$ при $t = t_0 = 0$. Из уравнения (7) тогда следует, что, поскольку x меняется непрерывно, dx/dt также меняется непрерывно и скачков нет, в то время как уравнение Акулова в точке $t = \tau$ дает в пределе (при $[A']_0 \rightarrow 0$) скачок, хотя в этой точке значение x в пределе исчезающе мало. Таким образом уже из этих соображений видно, что замена соотношения (13,3) соотношением (6) может привести к качественно другим результатам.

Введем безразмерное время

$$\xi = \frac{t}{\tau}, \quad \lambda = \frac{\theta}{\tau}.$$

Тогда

$$\alpha(t) = \alpha(\xi\tau) = \beta(\xi),$$

$$\alpha(t - \theta) = \alpha[(\xi - \lambda)\tau] = \beta(\xi - \lambda).$$

Далее полагаем $\beta(\xi) = \varepsilon_0 \eta(\xi)$. Тогда уравнение (7) примет вид:

$$\frac{d\eta}{d\xi} = \left(1 + \eta + \frac{g_0 b'_0 \tau}{k} \xi [\eta(\xi) - \eta(\xi - \lambda)]\right) (1 - \varepsilon_0 \eta). \quad (8)$$

Обозначим $\eta(\xi - \lambda) = \bar{\eta}$ и будем считать, что для

$$0 \leq \xi \leq \lambda, \quad \bar{\eta} \equiv 0.$$

Тогда уравнение (8) окончательно будет иметь вид:

$$\frac{d\eta}{d\xi} = [1 + \eta + \sigma \xi (\eta - \bar{\eta})] [1 - \varepsilon_0 \eta], \quad (9)$$

где

$$\sigma = \frac{g_0 b'_0 \tau}{k}.$$

Начальные условия для η те же, что и для α , именно: $\eta = 0$ при $\xi = 0$, что означает отсутствие конечных продуктов реакции в момент начала реакции.

Докажем следующую теорему относительно решения уравнения (9)³.

Теорема. Пусть Z и E — произвольные, но фиксированные положительные числа, не равные бесконечности. Тогда в замкнутой области

$$0 \leq \xi \leq Z, \quad 0 \leq \varepsilon_0 \leq E \quad (10)$$

уравнение (9) имеет единственное и притом равномерно-непрерывное решение

$$\eta = \eta(\xi, \varepsilon_0),$$

обращающееся в нуль при $\xi = 0$.

Прежде всего отметим следующие свойства всякого решения η уравнения (9).

С возрастанием ξ в окрестности $\xi = 0$ η возрастает. Действительно, при $\xi = 0$ $\eta = 0$, а $d\eta/d\xi = 1$ и η возрастает. Решение η не может убывать при возрастании ξ от 0 до ∞ . Действительно, если существует первая точка ξ_0 такая, что для $\xi > \xi_0$ η начинает убывать, то в точке $\xi = \xi_0$ η имеет максимум и $d\eta/d\xi = 0$. Но в этой точке, как это следует из (9), $\eta = 1/\varepsilon_0$, так как $\eta - \bar{\eta} \geq 0$ для $\xi \leq \xi_0$ и первый множитель в правой части (9) положительный.

В силу теоремы единственности, которая здесь будет доказана, существует только одно решение η , удовлетворяющее условию $\eta = 1/\varepsilon_0$ при $\xi = \xi_0$. Но для всех ξ постоянная величина $\eta = 1/\varepsilon_0$ есть решение уравнения (9), которое для значений $\xi \leq \xi_0$ должно совпадать с найденным решением, обращаясь в нуль в точке $\xi = 0$, что невозможно. Отсюда следует, что η не может превзойти значения $1/\varepsilon_0$, оставаясь для всех $0 < \xi < \infty$ положительным. Отсюда также следует, что для $0 < \xi < \infty$ $\eta - \bar{\eta} \geq 0$.

³ Общее исследование обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом содержится в работе Мышкиса [8].

Доказательство теоремы. Определим замкнутую область D изменения переменных ξ, η следующими неравенствами:

$$0 \leq \xi \leq Z, \quad 0 \leq \eta \leq \frac{2}{\varepsilon_0}. \quad (11)$$

Обозначим правую часть (9) через $\varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta, \bar{\eta})$. Тогда

$$d\eta/d\xi = \varphi. \quad (12)$$

Введем обозначения $\varphi_n = \varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta_n, \bar{\eta}_n)$. Тогда по формуле Лагранжа имеем

$$\varphi_n - \varphi_m = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \eta_m} \right)^* (\eta_n - \eta_m) + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{\eta}_m} \right)^* (\bar{\eta}_n - \bar{\eta}_m), \quad (13)$$

где производные вычислены в некоторой точке области D . Абсолютные значения частных производных $\partial \varphi / \partial \eta$ и $\partial \varphi / \partial \bar{\eta}$ области D не превосходят некоторого числа $M/2$, где M не зависит от $\xi, \eta, \bar{\eta}$ и ε_0 . Так как

$$\left| \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right| = |(1 + \sigma \xi)(1 - \varepsilon_0 \eta) - \varepsilon_0(1 + \eta + \sigma \xi(\eta - \bar{\eta}))| < 5 + 7\sigma Z + E,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{\eta}} \right| = |-(1 - \varepsilon_0 \eta)\sigma \xi| < 3\sigma Z,$$

то можно положить $M = 2(5 + 7\sigma Z + E)$. Тогда из (13) в области D получаем

$$|\varphi_n - \varphi_m| < M \max \{ |\eta_n - \eta_m|, |\bar{\eta}_n - \bar{\eta}_m| \}. \quad (14)$$

Неравенство (14) является условием Липшица для уравнения (9) с запаздывающим аргументом.

Применим метод последовательных приближений. В качестве первого приближения возьмем $\eta_0 = 0$; тогда $\varphi_0 = 1$ и

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \int_0^\xi \varphi_0 d\xi = \xi, & \bar{\eta}_1 &= \int_0^{\xi-\lambda} \varphi_0 d\xi = \xi - \lambda; \\ \eta_2 &= \int_0^\xi \varphi_1 d\xi, & \bar{\eta}_2 &= \int_0^{\xi-\lambda} \varphi_1 d\xi; \\ &\dots\dots\dots & & \dots\dots\dots \\ \eta_n &= \int_0^\xi \varphi_{n-1} d\xi, & \bar{\eta}_n &= \int_0^{\xi-\lambda} \varphi_{n-1} d\xi; \\ &\dots\dots\dots & & \dots\dots\dots \end{aligned} \quad (15)$$

Пусть для области D существует такое L , что $|\varphi| \leq L$. Можно принять $L = 3\left(1 + \frac{2 + 4\sigma Z}{\varepsilon_0}\right)$. Тогда, если ξ изменяется в интервале $0 \leq \xi \leq \xi_0$, где

$$\xi_0 = \min \left\{ Z, \frac{2}{\varepsilon_0 L} = \frac{2}{3(\varepsilon_0 + 2 + 4\sigma Z)} \right\},$$

то все η из (15) находятся в области D . Предел η_n при $n \rightarrow \infty$, очевидно, будет решением уравнения (9), содержащимся в области D . Этот предел существует. Действительно,

$$\lim \eta_n = \eta_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\eta_n - \eta_{n-1}). \quad (16)$$

Ряд (16) сходится абсолютно-равномерно относительно ξ в интервале $0 \leq \xi \leq \xi_0$ и относительно ε_0 в интервале $0 \leq \varepsilon_0 \leq E$, так как общий член ряда

$$|\eta_n - \eta_{n-1}| = \left| \int_0^{\xi} (\varphi_{n-1} - \varphi_{n-2}) d\xi \right| \leq \int_0^{\xi} |\varphi_{n-1} - \varphi_{n-2}| d\xi \leq M^n \frac{\xi^n}{n!}. \quad (17)$$

Это решение можно продолжить на интервал $0 \leq \xi \leq \xi_0 + h$, где

$$h \geq \frac{1}{\varepsilon_0 L} = \frac{1}{3(\varepsilon_0 + 2 + 4\sigma Z)} \geq \frac{1}{3(E + 2 + 4\sigma Z)}. \quad (18)$$

Величина h , определяемая соотношением (18), обусловлена свойством решения η не превосходить значения $1/\varepsilon_0$ и величиной области D для η , которая равна, согласно (11), $2/\varepsilon_0$. Так как интервал h конечный, то через конечное число N операций продолжения, расширяющих всякий раз интервал ξ на величину h , можно получить решение во всем интервале $0 \leq \xi \leq Z$.

В интервале $0 \leq \xi \leq \xi_0$, $\eta \leq e^{MZ}$. В каждом интервале $\xi_k \leq \xi \leq \xi_k + h$, соответствующем k -му продолжению, $\eta - \eta(\xi_k) < e^{Mh}$. Отсюда, вследствие конечности числа продолжений, η во всем интервале $0 \leq \xi \leq Z$ удовлетворяет неравенству: $\eta < Ne^{MZ}$. Так как Z, M, N не зависят от ε_0, ξ , то η — равномерно-непрерывная и ограниченная функция ξ, ε_0 в области $0 \leq \xi \leq Z$ и $0 \leq \varepsilon_0 \leq E$.

Число Z выбиралось произвольно, поэтому, повторяя те же рассуждения, можно получить решение в любом интервале $0 \leq \xi \leq Z^*$, где $Z^* > Z$, при этом новое решение в интервале $0 \leq \xi \leq Z$ совпадает со старым. Отсюда следует, что решение η продолжимо для всех $0 \leq \xi < \infty$.

Отметим важные свойства кривой $\eta = \eta(\varepsilon_0, \xi)$.

1. Наибольшее значение $\eta = 1/\varepsilon_0$ непременно достигается. Действительно, так как при заданном ε_0 , η ограничено на всей оси ξ и монотонно возрастает с возрастанием ξ , то при $\xi = \infty$, $d\eta/d\xi = 0$, а это возможно, как это следует из (9), лишь в том случае, когда в некоторой точке $0 < \xi \leq \infty$ $\eta = 1/\varepsilon_0$.

2. Значение $\eta = 1/\varepsilon_0$ достигается только на бесконечности. В самом деле, пусть значение $\eta = 1/\varepsilon_0$ достигается в точке $\xi^* < \infty$. Тогда в силу теоремы единственности существует лишь одно решение, продолжимое в обе стороны и принимающее значение $1/\varepsilon_0$ в точке ξ^* . За такое решение можно принять $\eta = 1/\varepsilon_0$ на всей оси ξ . Тогда это решение в силу теоремы единственности должно было бы совпадать с решением уравнения (9), принимающим значение $\eta = 0$ при $\xi = 0$, что невозможно. Следовательно, $\xi^* = \infty$.

Итак, доказано, что в любой, но фиксированной области (10) решение η уравнения (9) равномерно-непрерывно относительно ε_0 и ξ . Так как $\alpha(t) = \varepsilon_0 \eta(\xi)$, то из теоремы следует, что α равномерно, относительно t и ε_0 в интервале $0 \leq t \leq \tau Z$, стремится к нулю при стремлении ε_0 к нулю. Подставляя η и η в правую часть (9), получим, что производная $d\eta/d\xi$ есть равномерно-непрерывная в области (10) функция. Отсюда, так как

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\varepsilon_0}{\tau} \frac{d\eta}{d\xi},$$

то скорость реакции равномерно относительно t , ε_0 стремится к нулю при стремлении ε_0 к нулю. При $\varepsilon_0 = 0$ имеется единственное решение $\alpha = 0$ для всех $0 \leq t < \infty$.

Остается доказать единственность решения уравнения (9) при фиксированном ε_0 , удовлетворяющего условию $\eta = \eta^*$ при $\xi = \xi^*$, где $0 \leq \xi^* < \infty$, $0 \leq \eta^* \leq 1/\varepsilon_0$.

Предположим, что существуют два решения $\eta^{(1)}$ и $\eta^{(2)}$ такие, что $\eta^{(1)}(\xi^*) = \eta^{(2)}(\xi^*) = \eta^*$. Применим метод последовательных приближений для обоих решений. Для решения $\eta^{(1)}$ за нулевое приближение $\eta_0^{(1)}$ возьмем само решение $\eta^{(1)}$. Тогда, согласно (15),

$$\eta_1^{(1)} = \eta^{(1)}, \quad \eta_2^{(1)} = \eta^{(1)}, \dots, \eta_n^{(1)} = \eta^{(1)}, \dots$$

Для второго решения $\eta^{(2)}$ за нулевое приближение $\eta_0^{(2)}$ возьмем $\eta^{(2)}$. Тогда

$$\eta_1^{(2)} = \eta^{(2)}, \quad \eta_2^{(2)} = \eta^{(2)}, \dots, \eta_n^{(2)} = \eta^{(2)}, \dots$$

Согласно (12),

$$\eta^{(1)} - \eta^* = \int_{\xi^*}^{\xi} \varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta^{(1)}, \bar{\eta}^{(1)}) d\xi,$$

$$\eta^{(2)} - \eta^* = \int_{\xi^*}^{\xi} \varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta^{(2)}, \bar{\eta}^{(2)}) d\xi.$$

Вычитая одно из другого, получим

$$|\eta^{(1)} - \eta^{(2)}| \leq \int_{\xi^*}^{\xi} |\varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta^{(1)}, \bar{\eta}^{(1)}) - \varphi(\xi, \varepsilon_0, \eta^{(2)}, \bar{\eta}^{(2)})| d\xi.$$

Но согласно условию Липшица (14), которое имеет место для всякой области D , где $Z \geq Z_0 > \xi^*$,

$$\begin{aligned} |\eta^{(1)} - \eta^{(2)}| &\leq M \int_{\xi^* - \lambda}^{\xi} \max \{ |\eta^{(1)} - \eta^{(2)}|, |\bar{\eta}^{(1)} - \bar{\eta}^{(2)}| \} d\xi \leq \\ &\leq M^2 \int_{\xi^* - \lambda}^{\xi} d\xi \int_{\xi^* - \lambda}^{\xi} \max \{ |\eta^{(1)} - \eta^{(2)}|, |\bar{\eta}^{(1)} - \bar{\eta}^{(2)}| \} d\xi \leq \dots \\ &\dots \leq 2LM^n \frac{(\xi - \xi^* + \lambda)^n}{n!}, \end{aligned}$$

где $|\eta^{(1)}| \leq L$ и $|\eta^{(2)}| \leq L$ в области D . Так как n может быть сколь угодно большим, то правая часть стремится к нулю, откуда следует, что $\eta^{(1)} \equiv \eta^{(2)}$, что и требовалось доказать.

Если изобразить кривые $\alpha(t)$, удовлетворяющие уравнению Акулова (7) и исходящие из начала координат при различных ε_0 , то при $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ кривые α равномерно относительно t и ε_0 для фиксированного интервала t приближаются к оси t . Никакой скачок скорости реакции при $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ невозможен. Но, может быть, уравнение Акулова дает все же такой ход кривой $\alpha(t)$, при котором в начальной стадии реакции, т. е. для $t \leq \tau$ кривая $\alpha(t)$ более близко подходит к оси t , чем кривая, определяемая классическим уравнением без учета дополнительного члена, обусловленного действием активных молекул конечного продукта? На этот вопрос ответ отрицательный: решение уравнения Акулова (7) дает кривую, которая уже в начальной стадии реакции идет выше, чем это обусловлено классическим законом действующих масс. Действительно, из уравнения (7) следует, что

$$\xi = \int_0^{\eta} \frac{d\eta}{[1 + \eta + \sigma \xi (\eta - \bar{\eta})] [1 - \varepsilon_0 \eta]}, \quad (19)$$

а без учета дополнительного члена Акулова

$$\xi = \int_0^{\eta} \frac{d\eta}{(1 + \eta)(1 - \varepsilon_0 \eta)} \quad (20)$$

Из сравнения (19) и (20) следует, что для одного и того же η безразмерное время ξ , полученное из (20), больше ξ , полученного из (19), и кривая Акулова в начальной стадии идет выше классической кривой.

Таким образом теория Н. С. Акулова более далека от объяснения периода индукции, чем классическая теория действующих масс.

Выводы

Из изложенного следует, что метод, при помощи которого Н. С. Акулов получает свое уравнение автогенезиса, опирается на недопустимые математические ошибки. С устранением этих ошибок устраняется и внутренняя неустойчивость системы, которая, по Акулову, приводит к скачкообразному изменению скорости реакции («явление автогенезиса»).

Физико-химические представления об активных молекулах конечного продукта, которые, по Акулову, должны объяснить период индукции и скачок скорости реакции, также являются ошибочными и приводят к результатам, находящимся в противоречии с опытом.

Московский государственный
университет

Поступила в редакцию
23 апреля 1954 г.

Литература

- [1] Н. С. Акулов. Основы химической динамики, МГУ, Москва, 1940.—
[2] Н. С. Акулов. Теория цепных процессов, ГИТТЛ, М.—Л., 1951.—[3] А. Д. Мыш-
кис. Усп. матем. наук, 4, 99, 1949.

ОТВЕТ НА СТАТЬЮ В. Л. ГИНЗБУРГА ПО ПОВОДУ КНИГИ «РАСПРОСТРАНЕНИЕ РАДИОВОЛН» [1]

В. Н. Кессених

В статье [2] рассматриваются вопросы, по которым нами сделаны в книге [1] некоторые критические замечания, касающиеся отдельных ранее опубликованных работ В. Л. Гинзбурга. В своей статье В. Л. Гинзбург утверждает, что автор книги [1] ошибочно трактует важнейшие вопросы теории распространения радиоволн в ионосфере. К этим утверждениям В. Л. Гинзбург добавляет ряд весьма резких высказываний в адрес автора книги. Особенное возмущение выражается по поводу того, что книга вообще смогла увидеть свет.

Ниже мы останавливаемся на конкретных замечаниях, содержащихся в [2], рассматривая их в той же последовательности, как в статье.

1. Вопрос о действующем поле и радиоволновые параметры ионизированного газа

В I разделе статьи [2], в противовес взглядам, высказанным на стр. 100—103 книги [1], В. Л. Гинзбург делает ряд утверждений ([2], стр. 500), стремясь показать, что: «По меньшей мере странно доказывать общеизвестный факт, что феноменологическая электродинамика и понятие поляризации применимы и к плазме...».

Утверждения В. Л. Гинзбурга ошибочны, несмотря на ссылку на «общеизвестный факт». Действительно:

1) Если вектор объемной поляризации $\mathbf{P} = N_d \mathbf{p}$ обусловлен наличием реальных диполей (т. е. пар зарядов противоположных знаков с ограниченным взаимным расстоянием) с моментом $\mathbf{p}$ и числом диполей в единице объема N_d , то сдвиг фазы $\partial \mathbf{P} / \partial t$ по отношению к фазе напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ вообще всегда меньше $\pi/2$. Поэтому определение $\mathbf{P}$ через составляющую тока, имеющую фазу $\partial \mathbf{E} / \partial t$, законно только до тех пор, пока мы воздерживаемся от рассмотрения дополнительных полей типа полей внутри лоренцовой сферы.

2) Разложение полного тока на ток смещения и ток проводимости, взятые порознь, не имеет физического смысла для сред, содержащих свободные и связанные заряженные частицы, что хорошо показано, например, Е. Л. Фейнбергом в книге, соавтором которой является В. Л. Гинзбург (см. [3], стр. 15).

3) Непосредственное введение $\mathbf{P}$ путем разложения совокупности зарядов противоположного знака на элементарные диполи для плазмы невозможно вследствие того, что взаимные расстояния любой пары зарядов в плазме не ограничены. Так, например, при частоте столкновения электрона $\nu = 10^8 \text{ сек.}^{-1}$ (слой F_2), даже при $T = 200^\circ \text{K}$, тепловое движение электрона дает перемещение порядка 10 см за один период колебаний поля при $f = 10^6 \text{ гц}$. В то же время амплитуда смещения электрона под действием переменного поля в 1 мВ/м составит

при той же частоте около $5 \cdot 10^{-4}$ см, т. е. величину, в 20 000 раз меньшую теплового смещения. Это обстоятельство несущественно для расчета внешнего когерентного поля электронов и весьма существенно для расчета действующего поля.

4) В однородном чисто вихревом поле, соответствующем полю плоских радиоволн при нормальном падении на плоско-слоистую квазинейтральную плазму,

$$\bar{\rho} = 0 \quad (1)$$

и

$$\operatorname{div} \bar{\rho} \mathbf{v} = 0. \quad (2)$$

Имея в виду, как это делает В. Л. Гинзбург, применить к $\mathbf{P}$ соотношения, следующие из электростатического определения ε :

$$\mathbf{P} = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} \mathbf{E}, \quad (3)$$

удобно при выборе выражений для скалярного и векторного потенциалов φ и $\mathbf{A}$ ограничиться обычными запаздывающими потенциалами, удовлетворяющими калибровочному условию Лоренца, т. е. для вакуума:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

и, соответственно, условию сохранения заряда. (При другой калибровке выражения для запаздывающих потенциалов неприменимы.)

При этом условии разложение скалярного потенциала движущихся зарядов плазмы на составляющую

$$\varphi_0 = \int \frac{\bar{\rho}(t - (r/c))}{r} dv, \quad (5)$$

которая обращается в нуль вследствие поперечной однородности поля и однородности плазмы и

$$\varphi^{(1)} = - \operatorname{div} \int \frac{\mathbf{P}[t - (r/c)]}{r} dv, \quad (6)$$

представляющую потенциал, соответствующий дипольному моменту зарядов, — не исчерпывает разложения потенциала в ряд по $r_k - r_{k_0}$, так как относящиеся к данному конечному объему изменения r_k не удовлетворяют условию малости и не могут быть сгруппированы парно, как это можно сделать в случае зарядов, образующих реальные диполи. Полное разложение потенциала в ряды поэтому содержит также и мультипольные составляющие. При этом, однако, вследствие чисто вихревого характера поля плоских однородных волн и однородности плазмы,

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0, \quad (7)$$

а следовательно, и

$$\partial \varphi / \partial t = 0. \quad (8)$$

Это значит, что обусловленная внешним переменным полем переменная составляющая скалярного потенциала φ равна всюду нулю, вследствие взаимной компенсации объемной, дипольной и всех высших мультипольных составляющих при усреднении. Тот же ход рассуждений может быть применен и при любой другой калибровке φ и $\mathbf{A}$ с соответствующей заменой выражений φ и $\mathbf{A}$ через ρ и $\mathbf{j}$.

Так как справедливо (2), то существует отличный от нуля вектор $\mathbf{M}$, удовлетворяющий условию:

$$\frac{1}{c} \overline{\rho \mathbf{v}} = \text{rot } \mathbf{M}. \quad (9)$$

Таким образом совершенно очевидно, что вихревой ток в плазме обладает магнитным моментом, отличным от нуля, так же как совершенно очевидно, что этот магнитный момент не имеет никакого отношения к магнитной восприимчивости электронного газа в постоянном магнитном поле.

В. Л. Гинзбург в [2], однако, утверждает: «...между тем общеизвестно, что магнитный момент определяет не диэлектрическую, а магнитную проницаемость...». Это упоминание о магнитной проницаемости здесь столь же неуместно, как, например, было бы неуместно говорить о магнитной проницаемости вещества немагнитного проводящего листа, вихревые токи в котором своим магнитным полем уменьшают напряженность и индукцию первичного магнитного поля.

Приведенные соображения полностью опровергают аргументацию В. Л. Гинзбурга.

К сказанному следовало бы добавить, что ограниченность феноменологического применения ϵ и $\mathbf{P}$ к случаю переменных полей в электродинамике давно известна. Можно, например, сослаться на статью Рытова и Юдкевича [4], где рассматривается и разъясняется феноменологический парадокс для сред с $\epsilon(\omega) < 0$. В книге Стрэттона [5] (стр. 379) рассматривается различие между вектором диэлектрической поляризации и вектором поляризации, определяемым через плотность тока свободных зарядов. Наконец, вопрос о связи отрицательной диэлектрической проницаемости плазмы с индуктивным по фазе током, образованным движением свободных электронов, давно уже обсуждается в литературе, посвященной электрическим и магнитным свойствам плазмы (см., например, [6]).

Таким образом и аргумент «общеизвестности», который остается в распоряжении В. Л. Гинзбурга, оказывается весьма сомнительным.

2. Вопрос о распространении плоской волны в слоисто-неоднородной среде

Во II разделе своей критической статьи [2] В. Л. Гинзбург касается вопроса о доказательстве тождества

$$|R_0| \equiv 1$$

на основании формулы (59.9) из [1]. В. Л. Гинзбург правильно отмечает опisku, допущенную в трех строках промежуточных вычислений на стр. 342 [1]¹. Никакого влияния допущенная ошибка на ход рассуждений и на конечный результат не оказывает. Уделив много внимания этой ошибке, В. Л. Гинзбург уклонился от рассмотрения принципиальной ошибки в своих собственных работах, о которой упомянуто в § 60 книги [1].

Несмотря на упоминание о функции Эйри, В. Л. Гинзбург во всех работах, вплоть до книги [3], повторяет в неизменном виде расчет, опубликованный в 1944 г. [7] и представляющий формальный перенос

¹ Для исправления ошибки достаточно на стр. 342 в строке 9 снизу ввести пропущенный множитель A перед R_0 , в формуле (59,10), в правой ее части, A заменить на A_1 и нумерованную формулу строки 5 снизу записать в виде: $R_0 = P/P^*$, где $P = e^{i\pi/8} [H_{1/2}^{(1)} - iH_{-1/2}^{(1)}] + e^{-i\pi/8} [H_{1/2}^{(2)} - iH_{-1/2}^{(2)}]$ и аргумент функций Ганкеля равен $2/3 k_0 z_1$.

известного в литературе решения на случай поглощающих сред, причем решение проводится без помощи функций Эйри.

Легко убедиться в том, что ни решения (66.4) из книги [3], ни их первые производные по z в случае $\alpha \neq 0$ и $\beta \neq 0$ не переходят друг в друга при $z = z_1$ и представляют собой два разных решения. Поэтому в случае поглощающей среды должен быть произведен выбор одного частного решения для всей области значений $z > 0$, а именно, решения, исчезающего на бесконечности.

Такое решение и дано в § 60 книги [1].

Целесообразно отметить, что для $z \rightarrow \infty$ аргумент функции $H_{1/2}$ в (60.2) принимает вид:

$$\omega = \frac{2}{3} k_0 z_1^{-1/2} (1 + \beta^2)^{1/2} z^{3/2} - i \frac{4}{3} k_0 z_1^{1/2} (1 + \beta^2)^{1/2} z^{1/2} \left(\alpha + \beta \frac{z}{z_1} \right), \quad (10)$$

если для всей области значений $z > 0$ принять положительный знак корня квадратного. В таком случае решение будет выражаться через $H_{1/2}^{(2)}(\omega)$, убывая при $z \rightarrow \infty$, как $\exp \left[-\frac{4}{3} k_0 z_1^{1/2} (1 + \beta^2)^{1/2} z^{1/2} \left(\alpha + \beta \frac{z}{z_1} \right) \right]$, что удовлетворяет условиям на бесконечности при любых $\alpha > 0$, $\beta > 0$.

При указанном выборе знака корня данное в (60.3) книги [1] выражение коэффициента отражения принимает вид (если выбрать более удобные рекуррентные формулы для $H_{1/2}$):

$$R = \frac{H_{1/2}^{(2)} - i(1 + i\alpha)^{1/2} H_{-1/2}^{(2)}}{H_{1/2}^{(2)} + i(1 + i\alpha)^{1/2} H_{-1/2}^{(2)}} \equiv 1 - \frac{2}{1 + [H_{1/2}^{(2)} / i(1 + i\alpha)^{1/2} H_{-1/2}^{(2)}]}, \quad (11)$$

причем аргумент функций H равен $\frac{2}{3} \frac{k_0 z_1}{1 - i\beta} (1 + i\alpha)^{1/2}$.

При больших значениях $k_0 z_1$ и малом α , как легко видеть, $R \approx 0$. При $\alpha \rightarrow \infty$ (что соответствует $\sigma \rightarrow \infty$) $R = -1$. Выражение же (66.13) для E , данное В. Л. Гинзбургом в [3], которое по физическому смыслу граничных условий должно обращаться в нуль при $\sigma \rightarrow \infty$, на самом деле либо обращается в бесконечность [при выборе значения $(-i)^{1/2} = (1 + i)/\sqrt{2}$], либо обращается в единицу [при противоположном знаке $(-i)^{1/2}]$, что в обоих случаях не соответствует граничным условиям на поверхности идеально проводящей среды. В то же время при $\alpha \rightarrow \infty$ асимптотические выражения цилиндрических функций, использованные в [3], полностью применимы.

В этом же разделе II статьи [2] В. Л. Гинзбург защищает неверное положение о том, что функции Ганкеля 1-го и 2-го рода представляют в чистом виде прямую и отраженную волны, которые могут существовать независимо друг от друга. Для рассмотрения этого утверждения мы можем применить известный метод разложения волны в неоднородной среде на прямую и отраженную волны, в том виде, как его развил Бреховских в работе [8].

Если волновая функция есть $\text{Re } f(z) e^{-i\omega t}$ и волновое число есть $k_0 n(z)$, то комплексные амплитуды прямой и отраженной компонент $f(z)$, соответственно $P(z)$ и $R(z)$, находятся из уравнений:

$$f = P + R, \quad (12)$$

$$\frac{df}{dz} = ik_0 n(P - R). \quad (13)$$

При этом P и R должны удовлетворять дифференциальным уравнениям:

$$\frac{dP}{dz} - ik_0 nP + (P - R) \frac{d}{dz} \ln n(z) = 0, \quad (14)$$

$$\frac{dR}{dz} + ik_0 n R - (P - R) \frac{d}{dz} \ln n(z) = 0. \quad (15)$$

Только в случае однородной среды члены связи в (14) и (15) исчезают и P и R становятся независимыми друг от друга.

Неоднородность среды приводит к тому, что любое частное решение уравнения

$$f''(z) + k_0^2 n^2(z) f(z) = 0 \quad (16)$$

не является чисто бегущей волной. Полагая, например, что

$$f(z) = x^{1/2} H_{1/2}^{(2)}\left(\frac{2}{3} x^{3/2}\right), \text{ где } x = (k_0 z_1)^{2/3} \left(1 - \frac{z}{z_1}\right),$$

легко убедиться в том, что существуют и отличны от нуля обе составляющие P и R , равные

$$P = \frac{1}{2} \left(f - \frac{i}{k_0 n} \frac{df}{dz} \right), \quad (17)$$

$$R = \frac{1}{2} \left(f + \frac{i}{k_0 n} \frac{df}{dz} \right). \quad (18)$$

Для того чтобы подтвердилось утверждение В. Л. Гинзбурга, необходимо, чтобы функция

$$f(z) = (k_0 z_1)^{1/2} \left(1 - \frac{z}{z_1}\right)^{1/2} H_{1/2}^{(1,2)} \left[\frac{2}{3} k_0 z_1 \left(1 - \frac{z}{z_1}\right)^{3/2} \right]$$

была решением одного из дифференциальных уравнений:

$$f \pm \frac{i}{k_0 n} \frac{df}{dz} = 0,$$

что совместимо с (16) лишь при условии $n(z) = 0$, что, в свою очередь, равносильно линейной зависимости от z фазы в асимптотическом выражении функций Ганкеля. В рассматриваемом случае неоднородной среды существенно, что $dn/dz \neq 0$, а следовательно, и утверждение В. Л. Гинзбурга оказывается неверным.

Таким образом все возражения В. Л. Гинзбурга по поводу критики его ошибок по вопросам, затронутым в разделе II статьи [2], являются несостоятельными.

3. О тройном расщеплении импульсных сигналов при отражении от ионосферы

В разделе III [2] идет речь об ошибочности взглядов, высказанных в [1] (стр. 239 и 347) по вопросам тройного расщепления импульсных сигналов при отражении от ионосферы.

В противоположность [1] критик заявляет, что условия отражения и взаимодействия нормальных типов волн в анизотропной среде не отличаются от условий отражения и взаимодействия в изотропной среде. В связи с этим находится утверждение Гинзбурга о том, что в случае, рассмотренном Виноградовой [9,10], т. е. в случае резких границ раздела, «волны одного типа переходят в волны другого типа, точно так же, как в изотропном случае появляется отраженная волна, отсутствующая для плавного переходного слоя» ([2], стр. 507).

В действительности же, в случае анизотропных сред имеет место принципиально важная особенность отражения волны типа (2) или так называемой «обыкновенной». В данном случае рассматривается переход через границу раздела области I, где $n_{(1)}^2 < 0$ ($n_{(1)}$ соответствует «необыкновенной» волне), а $n_{(2)}^2 > 0$ к области II, где $n_{(2)}^2 < 0$, причем не-

обыкновенная волна имеет вещественную фазовую скорость ($n_{(1)}^2 > 0$). При таком переходе отражение обыкновенной волны (за исключением случая поперечного распространения) не является полным. В случае же изотропной среды волна типа (1) вообще отсутствует, а отражение волны при переходе к области $n^2 < 0$ является полным. В этом и состоит принципиальное различие между случаями изотропной и анизотропных сред. Это различие сохраняется и при плавном переходе от одной области к другой при достаточной величине градиента показателя преломления.

Взгляды В. Л. Гинзбурга по вопросу о природе ионосферных слоев и о реальной возможности наблюдения тройного расщепления изложены в книге [3]. Сопоставляя сказанное на стр. 494, 503 и 504 [3], можно прийти к ошибочному выводу, что «утраивание сигналов в F-слое в средних широтах не может наблюдаться в течение длительного времени». В действительности же высотно-частотные характеристики ионосферы с тройным расщеплением наблюдаются не только в средних широтах, в Канаде и Швеции, но и на южных ионосферных станциях Индии, причем, как правило, достаточно устойчиво, в течение нескольких сеансов ручной ионосферной станции, т. е. в течение нескольких десятков минут.

Из примера, рассмотренного Виноградовой [10], видно, что для получения третьего сигнала, имеющего заметную амплитуду (14% от падающего), для магнитного наклонения 70° ($\theta = 20^\circ$) достаточно скачка в электронной концентрации на 1% на расстоянии порядка длины волны. Этому соответствует при $N = 10^5 \text{ см}^{-3}$ $dN/dz \approx 0,2 \text{ см}^{-4}$, т. е. величина градиента, нередко наблюдаемая в нормальном ночном слое F_2 , с резко выраженным спадом концентрации ниже максимума. «Диффузионное размывание», о котором говорится в [3], не препятствует устойчивому существованию таких градиентов, так как время диффузионного размывания не определяется, как это утверждает Гинзбург, временем свободного пробега электронов. Не следует забывать о том, что диффузия в ионосфере по своему характеру приближается к амбиполярной диффузии в плазме, причем на величину градиента электронной концентрации существенное влияние оказывает статическое электрическое поле Земли.

Устойчивое длительное наблюдение подобных градиентов является экспериментальным фактом, поэтому немудрено, что ионосферные станции на средних широтах систематически наблюдают в ночное время тройные расщепления.

Задача о тройном расщеплении в ионосфере представляет собой одну из труднейших задач теории распространения радиоволн в неоднородной анизотропной среде. Первые шаги теории в этом направлении носили формальный характер, в результате чего возможность явления вообще отрицалась. В работах [9,10] впервые для идеализированных случаев была строго показана возможность эффекта, как результата особенностей отражения на границе раздела анизотропных сред. В случае размытой границы эффект также теоретически возможен, в чем можно, например, убедиться, сшивая решения при помощи численного интегрирования для случая реально существующих больших градиентов. Последний этап расчетов В. Л. Гинзбурга, опубликованный в [3] (см. стр. 490 и 493), попрежнему основан на методе возмущений и продолжает оставаться некорректным (в особенности для случая больших градиентов), несмотря на исправление ряда ошибок, сделанных В. Л. Гинзбургом в предыдущих работах. Это признает и сам автор. Спор относительно строго рассмотренных в [9,10] и [1] частных случаев сводится только к вопросу о возможности существования градиентов порядка 10^{-1} см^{-4} .

Как видно из предыдущего, попытки отрицать возможность существования таких градиентов основаны на ошибочном представлении о характере диффузионных процессов в ионосфере.

Анализ раздела III [2] показывает, что все критические замечания В. Л. Гинзбурга по поводу рассмотрения вопроса о магнито-ионном эффекте в ионосфере не обоснованы.

Заключение

Книга [1] обладает многими недостатками. Чрезвычайно досадно наличие ряда опечаток (всего 26), которые по разным причинам не удалось указать в списке, приложенном к книге.

Ряд существенных недочетов связан с конспективностью изложения и несоответствием между объемом затронутых вопросов и объемом книги. Избранный автором порядок расположения материала может вызвать возражения и является спорным. Автор весьма благодарен читателям и рецензентам, сообщившим ему о замеченных недостатках.

Статья В. Л. Гинзбурга [2] в своей основе не стремится к вскрытию действительных недостатков книги и построена на ошибочной аргументации.

Сибирский физико-технический
институт

Поступила в редакцию
2 февраля 1954 г.

Литература

- [1] В. Н. Кессених. Распространение радиоволн, Гостехтеоретиздат, М., 1952.— [2] В. Л. Гинзбург. ЖЭТФ, 25, 498, 1953.— [3] Я. Л. Альперт, В. Л. Гинзбург и Е. Л. Фейнберг. Распространение радиоволн, Гостехтеоретиздат, М., 1953.— [4] С. М. Рытов и Ф. С. Юдкевич. ЖЭТФ, 10, 887, 1940.— [5] Дж. А. Стрэттон. Теория электромагнетизма, Гостехиздат, Л., 1948.— [6] Р. Ромпе и М. Штеенбек. Усп. физ. наук, 25, 325, 1941.— [7] Я. Л. Альперт и В. Л. Гинзбург. Изв. АН СССР, сер. физ., 8, 2, 42, 1944.— [8] Л. М. Бреховских. Журн. техн. физики, 19, 1126, 1949.— [9] М. Б. Виноградова. ЖЭТФ, 17, 711, 1947.— [10] М. Б. Виноградова. Изв. АН СССР, сер. физ., 12, 288, 1948.

О СТАРЫХ И НОВЫХ ОШИБКАХ В. Н. КЕССЕНИХА

В. Л. Гинзбург

В моей статье [1] (ниже цитируется, как I) было указано на наличие в книге В. Н. Кессениха [2] серьезных ошибок. Ряд других ошибок и недочетов этой книги вскрыт также в появившейся позже рецензии [3]. Ответ В. Н. Кессениха [4] не вносит ничего нового в этот вопрос, поскольку в ответе ни только не опровергнуты сделанные в I критические замечания, но и имеются новые ошибки. Квалифицированный читатель — физик без труда может убедиться в сказанном, но так как книга [2] предназначена, в первую очередь, для студентов, а также, учитывая характер ряда утверждений В. Н. Кессениха [4], необходимо хотя бы кратко остановиться здесь на его ответе.

1. В I нам пришлось напомнить, что в плазме, как и в других средах, в линейном приближении можно положить среднюю плотность микротока $\overline{\rho \mathbf{v}} = \sum_i \rho_i \mathbf{v}_i$ равной

$$\mathbf{j} + i\omega \mathbf{P} = \sigma \mathbf{E} + i\omega(\epsilon - 1)/4\pi \cdot \mathbf{E},$$

где $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$ и среда предполагается немагнитной ($\mu = 1$). Тем самым введение поляризации $\mathbf{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \mathbf{E}$ и диэлектрической постоянной плазмы ϵ оказывается вполне возможным и закономерным, что как раз и отрицает В. Н. Кессених в книге [2], где утверждается также, что диэлектрическая постоянная плазмы связана с магнитным моментом токов. На этих ошибочных утверждениях В. Н. Кессених продолжает настаивать и в своем ответе [4], причем отрицание возможности введения поляризации $\mathbf{P}$ либо носит голословный характер, либо связано с введением другой величины, обозначаемой той же буквой $\mathbf{P}$. Так, в первом пункте раздел 1 ответа буквой $\mathbf{P}$ обозначается величина $\mathbf{P}' = N_d \mathbf{p}$, где N_d — концентрация и $\mathbf{p}$ — момент диполей. Очевидно, что $i\omega \mathbf{P}' = i\omega N_d \mathbf{p} = \rho \mathbf{v} = \mathbf{j} + i\omega \mathbf{P}$, т. е. при $\mathbf{j} \neq 0$, $\mathbf{P}' \neq \mathbf{P}$. Далее в [4] приводится ссылка на книгу [5], где на стр. 379 буквой $\mathbf{P}$ обозначена уже величина $\mathbf{j} / i\omega$ (в [5] записано $\mathbf{j} = \partial \mathbf{P} / \partial t$, причем отличие этой величины от поляризации в обычном смысле оговорено буквально на следующей стр. 380). Обозначать буквой $\mathbf{P}$ не поляризацию, а другие величины, или называть поляризацией величину, отличную от вводимой обычно, разумеется, можно, но, конечно, это ни в малейшей степени не опровергает возможности и целесообразности обычного введения поляризации (см. выше), что как раз и отрицается В. Н. Кессенихом [2,4]. Это отрицание не подкрепляется, конечно, и упоминаемым в ответе [4] замечанием Е. Л. Фейнберга ([6], стр. 15) о возможности с равным правом вводить как комплексную диэлектрическую постоянную, так и комплексную проводимость. Столь же мало доказывает «ограниченность феноменологического применения ϵ и $\mathbf{P}$ к случаю

переменных токов» [4] рассмотренный в [7] (см. также [6] § 68) вопрос о выражении для плотности энергии в диспергирующей среде. Ссылка в [4] на этот вопрос имеет смысл, лишь если, без всяких на то оснований, отрицать возможность учета дисперсии в рамках феноменологической теории.

Ничего нового, конечно, нельзя доказать и записывая $\overline{\rho \mathbf{v}}$ в виде $\overline{\rho \mathbf{v}} = \text{rot} \mathbf{M}$ [уравнение (9) ответа]. В силу уравнений поля $\text{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \overline{\rho \mathbf{v}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$, $\text{div} \mathbf{E} = 4\pi \overline{\rho}$ и используемого В. Н. Кессенихом условия $\overline{\rho} = 0$ [уравнение (1)], действительно, $\text{div} \overline{\rho \mathbf{v}} = 0$ и можно считать $\overline{\rho \mathbf{v}}$ ротором некоторого вектора $\mathbf{M}$, который, разумеется, не нужно смешивать с намагниченностью $\mathbf{I} = \frac{\mathbf{B} - \mathbf{H}}{4\pi}$, которое также часто обозначают буквой $\mathbf{M}$. (Вектор $\mathbf{I}$ фигурирует в соотношении $\overline{\rho \mathbf{v}} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + c \text{rot} \mathbf{I}$; в неферромагнитной среде $\mathbf{I} = \frac{\mu - 1}{4\pi} \mathbf{H}$ и при $\mu = 1$ $\mathbf{I} = 0$, как это и предполагалось нами выше.) Однако запись $\overline{\rho \mathbf{v}} = \text{rot} \mathbf{M}$ при $\overline{\rho} = 0$ ни в какой мере не противоречит соотношению $\overline{\rho \mathbf{v}} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}$, поскольку условие $\text{div} \left(\mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) = 0$ при $\overline{\rho} = 0$ автоматически вытекает из уравнения непрерывности $\text{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ (при $\overline{\rho} = 0$, $\text{div} \mathbf{E} = \text{div} (\mathbf{D} - 4\pi \mathbf{P}) = 4\pi \overline{\rho} = 0$ и $\text{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho = 4\pi \text{div} \mathbf{P}$, где ρ — средняя плотность так называемого свободного заряда, в то время как $\overline{\rho}$ есть средняя плотность «истинного» или микрочаряда). Таким образом введение вектора $\mathbf{M}$ не может служить для опровержения упомянутого в I общеизвестного факта, что магнитные моменты микротоков определяют не диэлектрическую, а магнитную проницаемость. Следовательно, для такого опровержения В. Н. Кессених ограничивается, по существу, заявлением: «Это упоминание о магнитной проницаемости здесь столь же неуместно, как например, было бы неуместно говорить о магнитной проницаемости немагнитного проводящего листа». Между тем, даже приведенная фраза свидетельствует об обратном, так как термин «немагнитный» именно и означает, что вещество листа имеет магнитную проницаемость $\mu = 1$; поэтому пользоваться понятием об этой проницаемости вполне уместно и в случае проводящего листа.

Заметим, наконец, что в том же разделе I ответа [4] делается неверное утверждение о приближенном характере формулы (6) ответа в силу неучета мультипольных моментов. В действительности же, при помощи дипольных моментов, распределенных по всему объему, можно представить любое поле (в этом и состоит смысл введения вектора Герца; см., например, [5]). Мультипольные же моменты появляются, когда все мультиполи, включая диполь, помещают в одну точку, что ни в коей мере не обязательно.

2. Во втором разделе статьи I были разобраны ошибки, допущенные В. Н. Кессенихом при рассмотрении отражения волн от линейного слоя. Ошибка, относящаяся к случаю отсутствия поглощения, в ответе [4] признается, но попрежнему утверждается, что решение при наличии поглощения не должно переходить в правильное решение, полученное при отсутствии поглощения. Действительно, сразу же вслед за формулой (11) ответа указывается, что при малом поглощении (малом α) $R \approx 0$. Между тем, при отсутствии поглощения коэффициент отражения $|R| = 1$, и должно иметь место постепенное, а не внезапное убывание R с ростом поглощения. Таким образом В. Н. Кессених продолжает настаивать на утверждении, неправильность которого не вызывает никаких сомнений. Попытка В. Н. Кессениха уклониться от рас-

смотрения этого вопроса путем указания на ошибки, якобы имеющие место в моих работах, тем более не достигает цели, что указываемые им «ошибки» вовсе не являются таковыми. Так, вообще говоря, решения (66,4) из [6] действительно не переходят друг в друга при $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$ и $z = z_1$. Но подобный переход и не должен иметь места, а его наличие никогда мной, конечно, не предполагалось, ибо решения (66,4) при $\alpha \neq 0$ и $\beta \neq 0$ должны переходить и переходят друг в друга не при $z = z_1$, а при $\xi = 0$, где

$$\xi = \operatorname{Re} \zeta = \operatorname{Re} \left\{ \left[\frac{\omega^2 (1 + i\beta)}{c^2 z_1} \right]^{1/2} \left(\frac{1 + i\alpha}{1 + i\beta} z_1 - z \right) \right\}$$

(см. [6], стр. 373 — 374). Далее, выражение (66,13) на стр. 374 [6] не обращается и не должно, в отличие от утверждения В. Н. Кессениха в [4], обращаться в нуль при $\sigma \rightarrow \infty$. Объясняется это тем, что, как указано в [6] на стр. 372, расчет проводится без учета скачка e' при $z = 0$, и поле (66,13) есть поле при $z = +0$; в этом же случае при $\sigma \rightarrow \infty$ в согласии с (66,13) $E \rightarrow 1$. Наконец, В. Н. Кессених утверждает, что в I защищается «неверное положение о том, что функции Ганкеля 1-го и 2-го рода представляют в чистом виде прямую и отраженную волны, которые могут существовать независимо друг от друга». Между тем, в I, как в этом сразу легко убедиться, указанное утверждение делается только в отношении асимптотического представления функций Ганкеля, соответствующего случаю справедливости приближения геометрической оптики. Но в таком случае это утверждение совершенно верно и доказано в I как раз для опровержения противоположного ошибочного мнения, высказанного в книге Кессениха [2]. В справедливости аргументации, приведенной в I, легко убедиться и из формул (17), (18) ответа [4] (вывод этих формул см. [8]), а именно, подставляя в (17) или (18) [4] асимптотические решения типа (5) из I, сразу же видим, что коэффициент отражения $R \sim \frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{dn}{dz} n^{-2}$, где n — показатель преломления. Но условие $\frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{dn}{dz} \frac{1}{n^2} \ll 1$ есть условие применения асимптотического приближения (см. [6], стр. 366), и, следовательно, в этом приближении отражение действительно отсутствует.

3. По вопросу об «умножении» отражающихся от ионосферы радиосигналов в [4] содержится мало нового, если не говорить о ссылках В. Н. Кессениха на какие-то мои мнимые ошибки. Отметим, что В. Н. Кессених по существу пытается привести в [4] лишь одно возражение на критику, содержащуюся в разделе 3 статьи I, а именно, указывает, что «время диффузионного размывания не определяется, как это утверждает В. Л. Гинзбург, временем свободного пробега электронов». В подкрепление своего мнения В. Н. Кессених ограничивается ссылкой на амбиполярный характер диффузии в ионосфере и «существенное влияние» статического электрического поля Земли. Между тем очевидно, что в силу высокой проводимости ионосферы статическое электрическое поле Земли в этой области атмосферы практически равно нулю. Что же касается амбиполярного характера диффузии, то в диффузионном приближении это обстоятельство действительно приводит к необходимости использовать в качестве эффективного времени свободного пробега, определяющего коэффициент диффузии, не время свободного пробега электронов τ_e , а некоторую среднюю величину, более близкую ко времени свободного пробега ионов τ_i . Но именно так и делаются оценки времени диффузионного размывания в [6], в частности, на цитируемой в [4], стр. 504, где для E-слоя приводится время размывания для ионной диффузии $\Delta t \sim 0,1$ сек. (см. также [6], § 91). Если же диффузионное при-

ближение неприменимо, как это имеет место в случае переходной области (границы) с размерами порядка или меньшими длины свободного пробега электронов, то время размывания этой границы Δt можно по порядку величины положить равным τ_e . Так мы и поступаем в I и [6], § 79, в применении к границам в F -слое, но, даже если считать, что время размывания границы в этом случае $\sim \tau_i$, то получаем значение $\Delta t \sim 0,1$ сек. вместо «нескольких десятков минут», о которых пишет В. Н. Кессених.

Резюмируя все сказанное, мы видим, что в своем ответе В. Н. Кессених не смог отвести ни одного из сделанных нами критических замечаний и не только повторяет свои прежние ошибки, но и делает ряд новых. Характер всех этих ошибок таков, что дальнейшая дискуссия с В. Н. Кессенихом представляется нам совершенно излишней.

Поступило в редакцию
20 сентября 1954 г.

Литература

- [1] В. Л. Гинзбург. ЖЭТФ, 25, 498, 1953. — [2] В. Н. Кессених, Распространение радиоволн, ГИТТЛ, М., 1952. — [3] Г. Г. Гетманцев, С. А. Жевакин, М. М. Кобрин и М. А. Миллер. Усп. физ. наук, 53, 298, 1954. [4] В. Н. Кессених, ЖЭТФ, этот выпуск, стр. 510. — [5] Д. А. Стрэттон. Теория электромагнетизма, Гостехиздат, М.—Л., 1948. — [6] Я. Л. Альперт, В. Л. Гинзбург и Е. Л. Фейнберг. Распространение радиоволн, ГИТТЛ, М., 1953. — [7] С. М. Рытов и Ф. С. Юдкевич. ЖЭТФ, 10, 887, 1940. — [8] Л. М. Бреховских, Журн. техн. физ., 19, 1126, 1949.

ОТ РЕДАКЦИИ

Редколлегия ЖЭТФ присоединяется к мнению В. Л. Гинзбурга и считает нецелесообразным дальнейшее продолжение дискуссии по этому вопросу.

К ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ

(По поводу статьи А. И. Костарева и И. Б. Боровского).

Э. Е. Вайнштейн, Р. Л. Баринский и К. И. Нарбутт

1. Опубликованная недавно статья Костарева и Боровского [1] является ответом авторов на ряд замечаний в их адрес, которые содержались в наших работах [2, 3]. В то же время значительная ее часть посвящена критике наших работ [2-8] по тонкой структуре рентгеновских краев поглощения, частично обобщенных в [9]. Разбросанность материала делает необходимым кратко сформулировать основные результаты, которые были получены в работах, подвергшихся критике со стороны Костарева и Боровского.

В упомянутых работах:

1) Предложены два дополняющих друг друга метода расчета тонкой структуры рентгеновского основного края поглощения атомов в молекулах соединений, которые позволяют, опираясь на данные опыта, вычислять положение, форму и относительную интенсивность линий поглощения, а также положение границы области непрерывных энергий.

2) При помощи упомянутого метода была расшифрована структура K -краев поглощения благородных газов. Это позволило обосновать выполненное ранее Парратом [10] эмпирическое разложение на селективные линии K -края поглощения аргона и исправить аналогичное разложение для криптона. Для аргона, кроме того, удалось вычислить потенциал ионизации, величина которого хорошо согласовалась с оптическими данными.

3) Было показано, что при помощи предложенного метода в большинстве случаев удастся расшифровать структуру краев поглощения всех изученных до сих пор молекул газов. В тех случаях, когда количественная расшифровка спектров поглощения оказалась затруднительной (Cl_2 , Bg_2), предложенный метод позволил объяснить особенности тонкой структуры этих спектров.

4) Впервые была показана связь параметров, характеризующих рентгеновские края поглощения, с важнейшими постоянными молекул. Это позволяет в ряде случаев вычислять упомянутые величины на основании данных, следующих из анализа рентгеновских спектров.

5) На примере рентгеновского K -края поглощения Ge в молекуле $GeCl_4$ был поставлен вопрос о соотношении тонкой структуры основного края поглощения и далекой тонкой структуры и предложен метод нахождения границы, разделяющей область дискретных и непрерывных энергий молекул.

6) Была расшифрована тонкая структура рентгеновских краев поглощения простейших ионов в растворах.

7) На основе развитых теоретических представлений о структуре рентгеновских спектров поглощения выяснено происхождение ряда линий испускания, до тех пор не получавших объяснения и обнаруженных, например, в спектре газообразного цинка.

8) Дана интерпретация и расшифрована структура краев рентгеновского поглощения K и Cl в кристалле KCl .

2. Основные возражения Костарева и Боровского сводятся к следующему:

1) Полагая, что сериальная формула «оправдывается... лишь для атомов щелочных металлов или ионов с аналогичной электронной оболочкой», авторы оспаривают возможность ее использования при расчете рентгеновских краев поглощения сложных молекул типа GeCl_4 или CS_2 , а также при истолковании рентгеновского поглощения в ионных кристаллах.

2) Авторы [1] критикуют данную нами интерпретацию основного рентгеновского K -края поглощения Ge в молекуле GeCl_4 и не согласны с предложенным в той же работе методом сопоставления выводов теории Кронига — Петерсена с экспериментом.

В связи с первым возражением заметим следующее. Существенным и определяющим отличием процесса рентгеновского K -поглощения от оптического возбуждения атома или молекулы является то, что удаление K -электрона относительно мало нарушает центральный характер внешнего поля K -ионизированной молекулы или иона с завершенными электронными оболочками. Поэтому систему, состоящую из вырванного из K -уровня электрона и атомного или молекулярного остатка, в большинстве случаев можно рассматривать как водородоподобную. При этом вырванный из K -уровня электрон играет роль орбитального электрона, а ионизированный в процессе поглощения рентгеновских лучей молекулярный остаток в целом — роль ядра с эффективным зарядом η .

Задача о поглощении рентгеновских лучей молекулами, таким образом, отличается от той, с которой имеют дело оптики. Последние при анализе процесса возбуждения в атомах, а тем более в молекулах, не могут обойтись без учета нецентрального характера поля. Однако даже в оптике для ряда молекул¹ были обнаружены группы линий, положение которых хорошо описывалось сериальной формулой. Использование этой формулы позволило с большой точностью вычислить потенциалы ионизации этих молекул. Правда, по понятным причинам эти линии характеризовались большими значениями главного квантового числа. Из вышесказанного ясно, что при рентгеновском K -поглощении последнее ограничение отпадает.

Для иллюстрации того, как далеко от истины может завести практикуемое Костаревым и Боровским формальное перенесение верных в оптике положений на случай рентгеновского K -поглощения, отметим, что вопреки их утверждению, что «формула Ридберга оправдывается, строго говоря, лишь для атомов щелочных металлов», как раз для описания процесса K -поглощения атомов щелочных металлов водородоподобная модель неприменима. Это объясняется тем, что один валентный электрон, имеющийся у щелочных металлов, искажает центральный характер поля K -ионизированного атома. Как легко видеть, дело отнюдь не решается «атомоподобностью»² рассматриваемых абсорбентов.

Насущной задачей исследований по тонкой структуре рентгеновских спектров поглощения было создание общих методов расчета³, базирующихся на определенной физической картине этого явления, взамен имевших место многочисленных частных попыток анализа структуры краев поглощения, когда исследователи ограничивались лишь качественными соображениями, а в подтверждение правильности того или иного способа анализа наблюдаемой структуры привлекались чисто умозри-

¹ К числу таких молекул относятся CO , HBr , HCl , N_2 , H_2 , O_2 и HJ . Применимость сериальной формулы для вычисления их потенциалов ионизации была показана в ряде работ (см., например, [1]).

² Этот термин, введенный Костаревым, представляется нам неудачным, так как он лишен ясного физического смысла.

³ Именно расчета, а не эмпирического подбора констант, как это утверждают Костарев и Боровский.

тельные аргументы о «наибольшей естественности» и т. п. Именно разнообразием попытки такого рода является вариант интерпретации K -спектра германия в молекуле GeCl_4 , предложенный Костаревым и Боровским.

В противоположность такому подходу, предложенный нами общий метод анализа экспериментальных кривых рентгеновского поглощения дает возможность единообразно разложить эти кривые на элементарные составляющие, исходя из определенных модельных представлений. Коль скоро мы имеем дело с атомом, молекулой или ионом, внешние электронные оболочки которых завершены, процесс K -поглощения можно рассматривать при помощи водородоподобной модели, так как в процессе K -поглощения указанные объекты действительно уподобляются водородоподобной системе. В этих условиях можно и должно воспользоваться соотношениями, вытекающими из водородоподобной модели: сериальной формулой, а также полученной нами формулой для интенсивности последовательных линий поглощения⁴. Тогда, измерив всего один параметр на конкретной кривой поглощения атома в любой молекуле рассматриваемого типа, оказывается возможным вычислить константы n^* и ν_∞ позволяющие однозначно воссоздать всю элементарную структуру основного K -края поглощения. Для благородных газов и ионов с внешней электронной оболочкой типа благородных газов законность применения этих модельных представлений бесспорна. Это было нами подтверждено на примере K -спектров аргона и ионов Zn^{++} [4, 6, 9]. Применительно к более сложным объектам — многоатомным молекулам — такой подход является некоторой идеализацией рассматриваемой задачи. Однако, как показали наши исследования, такая идеализация вполне допустима и позволяет провести анализ структуры K -спектров ряда сложных молекул [4, 9, 12].

Несколько иначе, чем в молекулах, обстоит дело в случае ионного кристалла и, в частности, кристалла KCl , рассмотренного нами в [2]. Здесь, конечно а priori, не очевидна возможность применения сериальной формулы для расчета краев поглощения. Поэтому при интерпретации тонкой структуры краев поглощения K и Cl мы шли не от теории и модельных представлений, а наоборот, от эксперимента. При этом было обнаружено (и с этими фактами, как бы их не истолковывать, нельзя не считаться): 1) что рентгеновские K -края поглощения K и Cl могут быть представлены как суперпозиция двух серий линий поглощения, положение которых подчиняется сериальному закону, и 2) что линии обеих серий представлены в спектрах обоих компонентов кристалла и отличаются только относительной интенсивностью.

Опираясь на этот, следующий из анализа экспериментальных данных факт, была построена схема энергетического спектра кристалла KCl , оценены ширины уровней и вычислены длины волн максимумов ультрафиолетового поглощения. Последние величины оказались в хорошем согласии с опытными данными. Таково основное содержание работы [2]. Что же касается теоретической интерпретации этих экспериментальных результатов, то ей в [2] (и не случайно) уделено мало места. Это связано с тем, что впредь до накопления большего количества фактов и надлежащего развития теории нам кажется преждевременным более детальное, чем это сделано в [2], углубление в суть этих явлений. Поэтому является следствием недоразумения утверждение авторов [1] о якобы имевшем место в [3] изменении наших представлений по сравнению с [2]. Обширная, связанная с этим аргументация авторов [1] беспредметна, так

⁴ Надо сказать, что все возражения Костарева и Боровского почему-то относятся только к сериальной формуле, а формула интенсивности не вызывает у них сомнений, хотя обе формулы являются следствием одной и той же модели, лежащей в основе выполненных нами расчетов.

как приписываемое нам Костаревым и Боровским «отождествление серии уровней кристалла с экситонной системой уровней...» неверно. Это видно хотя бы из того, что в [2] мы противопоставляем нашу интерпретацию края поглощения экситонной теории Кошуа и Мотта [13]. Экситоны упоминаются в [3] лишь с целью указать на возможность существования в кристалле электронных переходов, подчиняющихся сериальному закону Ридберга.

Переходим ко второму возражению Костарева и Боровского, касающемуся интерпретации тонкой структуры рентгеновского края поглощения Ge в молекуле GeCl_4 . Прежде всего следует отметить, что во всех исследованиях, опубликованных до нашей работы (в том числе и работах Костарева), все без исключения флуктуации коэффициента рентгеновского поглощения атомов в многоатомных молекулах, таких как GeCl_4 и AsCl_3 , трактовались как элементы тонкой структуры в смысле Кронига — Петерсена. Впервые (отличная от упомянутой) интерпретация части из этих флуктуаций, как принадлежащих возбужденным уровням молекулы, была предложена нами [5]. Как видно из текста статьи Костарева и Боровского, а также из опубликованного в 1953 г. автореферата диссертации Костарева [14], при интерпретации тонкой структуры основного края поглощения Ge в GeCl_4 авторы [1] в настоящее время уже не отстаивают точку зрения, которой они придерживались ранее, а принимают основные положения развитой нами теории [5]. При этом несущественно, что в [14] Костарев, полностью соглашаясь сданной нами интерпретацией происхождения первых двух максимумов поглощения, по-другому представляет себе природу третьего максимума, а в статье [1] предлагается отличный от вышеизложенного механизм образования всех трех максимумов. Важно лишь, что существо этих вариантов теории [1], [14] заключается в признании решающей роли, которую играют переходы $1s$ -электрона металла на молекулярные уровни при K -поглощении рентгеновских лучей молекулами, что и было показано в [2-8].

Детальный разбор и критика предложенной авторами [1] интерпретации тонкой структуры спектра Ge в молекуле GeCl_4 не входит в задачи настоящей статьи. Однако нельзя не отметить, что эта интерпретация противоречит принципу Франка — Кондона и содержит в себе ряд других необоснованных и ошибочных положений, к рассмотрению которых мы оставляем за собой право вернуться впоследствии. Что касается вопроса о границе раздела между дискретным и непрерывным энергетическими спектрами, начиная с которой, с нашей точки зрения, следует отсчитывать положения особых точек далекой тонкой структуры, то он совершенно искусственно связывается авторами [1] с сериальной формулой, при помощи которой устанавливается лишь положение этой границы. Этот вопрос имеет гораздо более общее значение. Теория Кронига — Петерсена по своему своему существу может претендовать на согласие с опытом лишь в области непрерывных энергий и неприемлема, как это указывалось самими авторами этой теории [15], в той области рентгеновского спектра, в которой распределение энергий дискретно. Именно в этом физический смысл замечания, которое делают по этому поводу Костарев и Боровский, признающие, что в области первых 20 eV, т. е. как раз в области тонкой структуры главного края, теория Кронига — Петерсена «выходит за пределы своей применимости». Странно, что после этого авторы не хотят сделать необходимых выводов и пытаются искусственными соображениями о «квазистационарности» K -возбужденных состояний атома отстоять свои старые позиции. При этом утверждение Костарева и Боровского, что полученное нами значение ионизационного потенциала K -возбужденной молекулы GeCl_4 занижено, даже если бы это и имело место в действительности, бездоказательно. В его подтверждение авторы не могут привести ничего, кроме своего «наиболее естественного» разложения.

3. Наряду с разобранными нами возражениями, в работе [1] имеется ряд мелких замечаний, основанных либо на недоразумении, либо на неверном истолковании текста и содержания наших работ. На некоторых из них мы кратко остановимся.

а) Авторы [1] неверно приписывают нам какую-то собственную теорию далекой тонкой структуры, которую противопоставляют теории Кронига — Петерсена. Никакой теории тонкой структуры за пределами основного края поглощения мы не выдвигали и не могли выдвигать по существу, так как ограничивались лишь рассмотрением области дискретных энергий поглощающей молекулы. С этой точки зрения нам безразлична судьба теории Кронига — Петерсена в той области, где ее имеет смысл сопоставлять с экспериментом. Никаких попыток улучшить степень ее согласия с экспериментом в областях спектра, находящихся за пределом основного края, мы не предпринимали и не могли предпринять по существу дела, вопреки утверждению Костарева и Боровского.

б) Неверно утверждение авторов [1] о том, что представление о дублетном расщеплении энергетической зоны $3p\ Cl$ в кристалле KCl является выводом из нашей теории⁵. На самом деле, основанием для вывода о наличии двух заполненных уровней в схеме, приведенной в [2], является экспериментальный факт существования эмиссионных линий K_{β_1} и K_{β_2} хлора, которые связаны с заполненной зоной, что очевидно. Сопоставление с ультрафиолетовым поглощением показывает, что электронные переходы могут происходить с обоих заполненных уровней.

в) Удивление вызывают «недоумения» Костарева и Боровского по поводу использованных в [5] цифровых данных, характеризующих тонкую структуру рентгеновского спектра поглощения Ge в $GeCl_4$. При желании

Таблица 1

Обозначение и положение флуктуаций коэффициента поглощения в K -крае Ge в $GeCl_4$ по данным различных авторов

По [10]		По [17]		По [18]		По [19]		По [20]		По [21]		По [15]	По [22]	По [23]
Обозн.	eV	Обозн.	eV	Обозн.	eV	eV	Обозн.	eV	Обозн.	eV	eV	eV	eV	eV
—	—	—	—	A	3,4	1,6	A	3,85	A''	2,8	—	—	—	2,8
—	—	—	—	α	8,5	4,8	α	7,41	—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—	6,9	B	9,48	—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—	11	β	11,8	α''	10,5	—	—	—	10
—	—	A	16	B'	18	13	C	14,4	A'	17,5	—	—	—	15
—	—	—	—	β_1	—	18	γ	20,8	α'	27	—	—	—	30
A	—	—	—	B ^I	—	22	D	26,9	A	34,5	—	23	—	36
α	50	α	48	β	46	39	δ	43,8	α	59	42	48	—	59
B	86	B	79	C	74	82	E	77,3	B	85	73	81	—	83
β	120	β	110	γ	117	110	ϵ	108	β	117	105	118	—	112
C	160	C	160	D	157	149	F	154	C	155	146	161	—	150
γ	203	γ	208	—	—	—	—	—	γ	196	189	210	—	—
D	257	D	258	—	—	—	—	—	—	—	—	264	—	—

они могли бы быть легко выяснены самими авторами. В табл. 1 приводится полная сводка экспериментальных и теоретических данных, полученных различными авторами, изучавшими рентгеновский спектр поглощения Ge в молекуле $GeCl_4$. Экспериментальные данные [19] и теоретические данные [23], включенные в таблицу, ввиду отсутствия в этих рабо-

⁵ В действительности в [2] ничего не говорится относительно причины возможного расщепления зоны $3p\ Cl$, кроме того, что она «до сих пор недостаточно ясна».

тах цифровых данных, указаны на основании имеющихся в них графиков. Тем не менее в [5] мы остановились именно на этих работах, так как в [19] наиболее четко выявлена структура K -спектра поглощения Ge в молекуле GeCl_4 , а теоретические расчеты [23] являлись одними из наиболее поздних и точных. Использование в [5] этих данных позволяло охватить всю структуру края поглощения, не говоря уже о том, что только данные [19] делали возможным в то время осуществить анализ тонкой структуры основного края поглощения германия в молекуле GeCl_4 . В настоящее время, после опубликования работы [20], имеется возможность уточнить проведенное в [5] сопоставление теории с экспериментом. Это выполнено в табл. 2, левая половина которой иллюстрирует старый способ сравнения теории Кронига — Петерсена с опытом, когда отсчет положения максимумов тонкой структуры ведется от фиктивного края поглощения. Правая половина таблицы иллюстрирует предложенный нами способ сравнения, когда из всей наблюдающейся на опыте структуры сначала выделяется область основного края (область дискретных уровней молекулы), а затем ведется отсчет положений максимумов и минимумов тонкой структуры от истинного края поглощения (точка ν_∞). Как видно из табл. 2, выводы, которые были сделаны в работе [5], остаются неизменными.

Таблица 2

Сопоставление экспериментальных и теоретических данных о положении флуктуаций коэффициента поглощения в K -крае Ge в GeCl_4 (энергия в электрон-вольтах)

Старый способ сравнения			Новый способ сравнения [6]			Примечание
Обознач.	Экспер.	Теория	Экспер.	Теория	Обознач.	
	[20]	[25]	[20]	[25]	[5]	
A	3,85	2,8	—8,3		$1s-5p$	Область дискретных уровней молекулы
α	7,41	—	—4,7		—	
B	9,48	—	—2,6		$1s-6p$	
β	11,8	10	—0,3		—	Область непрерывного энергетического спектра
C	14,4	15	2,3	2,8	A	
γ	20,8	30	8,7	10	α	
D	26,9	36	14,8	15	B	
δ	43,8	59	31,7	30	β	
E	77,3	83	—	36	C	
ϵ	108	112	—	59	γ	
F	154	150	65	83	D	
			96	112	δ	
			142	150	E	

г) Результатом недоразумения является то место статьи Костарева и Боровского (§ 2), в котором обсуждается вопрос о «дефектных» и «недефектных» кристаллах. Фраза из [3], которая лежит в основе этой дискуссии, имела целью лишь подчеркнуть принципиальную разницу между точкой зрения Костарева [24] и нашей, согласно которой электронные переходы на возбужденные энергетические уровни кристалла могли бы иметь место в любом, в том числе и в идеальном кристалле, если бы таковой существовал.

4. В статье Костарева и Боровского не дано удовлетворительного ответа на основные положения нашей критики [3]. Хотя они и признают факт существования в работе одного из них ошибки в вычислениях (в значительной мере подрывающей основы предложенной им теории) и хотя после ее исправления им приходится объяснять смещение линий в 10 eV (Костарев в [24] ошибочно считал эту цифру равной 2,7 eV), они тем не менее «считают возможным сохранить объяснение этого сдви-

га, лишь несколько уточнив его». Мы с этим не можем согласиться. Что же касается других наших возражений, то их не снимает ссылка на якобы легко поддающиеся расчету процессы рентгенизации и другие «очевидные и неоспоримые соображения». Не дано также ответа на одно из основных возражений, высказанных в [3], о том, что интенсивность эффектов, о которых они говорят, должна быть на 2—3 порядка ниже, чем интенсивность поглощения, связанного с переходами электронов на возбужденные уровни кристалла.

5. Резюмируя вышесказанное, мы не можем согласиться с мнением Костарева и Боровского по поводу некоторых из наших выводов и вынуждены признать их ответы на критические замечания в их адрес неудовлетворительными. Это отнюдь не значит, что мы считаем предложенный нами метод расчета основного рентгеновского края атомов безупречным и не нуждающимся в дальнейшем развитии, а все положения теории одинаково хорошо доказанными и не требующими исправления и уточнения. Напротив, очевидно, что труднейшие из этих вопросов, относящиеся к теории рентгеновских краев поглощения атомов в многоатомных молекулах и твердых телах, требуют еще дальнейших теоретических и экспериментальных исследований. Именно поэтому за три года, прошедшие со времени опубликования наших первых работ, посвященных теории тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения атомов в молекулах, наши усилия неизменно были направлены на уточнение и улучшение исходных теоретических представлений. В связи с этим были выполнены новые экспериментальные и теоретические исследования (см., например [2, 12, 25]). Они показали, в частности, что в первоначальном варианте, который был предложен нами для теоретической интерпретации спектра поглощения Ge в молекуле GeCl_4 [5], не был учтен один важный, но неизвестный нам в то время факт, заключающийся в том, что K -спектр поглощения атома каждого из компонентов, образующих молекулу, в общем случае должен быть представлен в виде наложения двух серий линий поглощения — основной и побочной. Основная серия связана с переходом K -электронов на возбужденные уровни молекулы, образованные преимущественно волновыми функциями атома, испытывавшего K -поглощение, а побочная серия — с переходами на уровни молекулы, содержащие в основном волновые функции другого атома. В зависимости от того, спектр какого из атомов в молекуле рассматривается, та или иная серия переходит в разряд «побочной». Это связано с тем, что переходы электрона, вырванного в процессе поглощения из K -уровня, происходят с большей вероятностью на те возбужденные уровни молекулы, которые преимущественно содержат волновые функции атома, испытывавшего K -поглощение, т. е., хотя молекула обладает единой системой возбужденных уровней, процесс K -поглощения оказывается чувствительным к природе этих уровней, а благодаря тому, что начала отсчета (энергии K -уровней) для каждого из компонентов молекулы различны, имеется возможность разделить по этому признаку внешние уровни молекулы. Такая возможность, как известно, в оптике исключена. В то же время она открывает, повидимому, новые пути для исследования структуры молекул. В частном случае спектра Ge в молекуле GeCl_4 вышесказанное позволяет внести коррективы в наши первоначальные представления о структуре края поглощения этого элемента. Появление третьего максимума на кривой зависимости коэффициента поглощения от частоты должно, повидимому, рассматриваться как результат наложения на основную серию линий поглощения побочной серии, наиболее интенсивная линия которой расположена вблизи этого максимума⁶.

⁶ Эта уточненная интерпретация максимума, являющаяся логическим развитием наших исходных положений [5] и следствием более поздних работ [2, 12], оказалась близкой к взгляду, который по этому частному поводу был высказан недавно Костаревым [14] и ныне им оставлен [1].

Развитие теории в этом направлении позволит, как нам кажется, успешно преодолеть некоторые затруднения, с которыми она сталкивалась до сих пор. Однако более подробное обсуждение относящихся сюда вопросов выходит за рамки настоящей статьи. К этому целесообразнее будет вернуться позднее, после накопления новых экспериментальных данных и завершения ведущихся в настоящее время теоретических и экспериментальных исследований.

Институт геохимии и аналитической химии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
25 мая 1954 г.

Примечание при корректуре. В самое последнее время появилась работа [26], в которой автор с успехом использовал развитый нами в [9] метод расчета рентгеновских спектров поглощения для расшифровки и интерпретации полученного им экспериментально K -края поглощения неона. Одновременно с этим автор пришел к выводу о возможности аналогичным путем «дать подробную интерпретацию структуры абсорбционных краев для твердых тел», в соответствии с тем, как это было выполнено нами в [2,3]. Так как истинный край поглощения в общем случае должен быть расположен в более коротковолновой области спектра [2,27], то автор на этом основании считает необходимым пересмотреть табличные значения для краев поглощения элементов.

Литература

- [1] А. И. Костарев и И. Б. Боровский. ЖЭТФ, 26, 377, 1954.—
[2] Э. Е. Вайнштейн, К. И. Нарбутт и Р. Л. Баринский. ДАН СССР, 82, 701, 1952.— [3] К. И. Нарбутт, Э. Е. Вайнштейн и Р. Л. Баринский. ДАН СССР, 87, 381, 1952.— [4] Э. Е. Вайнштейн, Р. Л. Баринский и К. И. Нарбутт. ДАН СССР, 77, 1003, 1951; 78, 39, 1951.— [5] Р. Л. Баринский, К. И. Нарбутт, Э. Е. Вайнштейн. ДАН СССР, 79, 49, 1951.— [6] К. И. Нарбутт, Р. Л. Баринский и Э. Е. Вайнштейн. ДАН СССР, 82, 567, 1952.— [7] Р. Л. Баринский, Э. Е. Вайнштейн и К. И. Нарбутт. ДАН СССР, 82, 355, 1952.— [8] Р. Л. Баринский, Э. Е. Вайнштейн и К. И. Нарбутт. ДАН СССР, 83, 199, 1952.— [9] Э. Е. Вайнштейн, Р. Л. Баринский и К. И. Нарбутт. ЖЭТФ, 23, 593, 1952.— [10] L. G. Parratt. Phys. Rev., 56, 295, 1939.— [11] Г. Герцберг. Спектры и строение двухатомных молекул, ИИЛ, Москва, 1949, стр. 345.— [12] К. И. Нарбутт. ДАН СССР, 93, 21, 1952.— [13] J. Cauchois a. N. Mott. Phil. Mag., 40, 1260, 1949.— [14] А. И. Костарев. Автореферат диссертации «Исследования по теории рентгеновских спектров поглощения», КГУ, 1953.— [15] H. Petersen. ZS. f. Phys., 98, 569, 1936.— [16] D. Coster a. G. Klamer. Physica, 1, 889, 1934.— [17] Drynski, R. Smoluchowski. Physica, 6, 929, 1939.— [18] S. Stephenson. Phys. Rev., 71, 84, 1947.— [19] C. Shaw. Phys. Rev., 70, 643, 1946.— [20] H. Glaser. Phys. Rev., 82, 616, 1951.— [21] D. Hartree, R. Kronig a. H. Petersen. Physica, 1, 895, 1934.— [22] А. И. Костарев. Журн. физ. хим., 20, 1, 1946.— [23] E. Corson. Phys. Rev., 70, 645, 1946.— [24] А. И. Костарев. ЖЭТФ, 22, 628, 1952.— [25] Э. Е. Вайнштейн. ДАН СССР, 91, 1059, 1953.— [26] J. Vačkovsky. Чехосл. физ. журн., 4, 150, 1954.— [27] Э. Е. Вайнштейн и М. М. Кахана. Справочные таблицы по рентгеновской спектроскопии, Изд-во АН СССР, М., 1953, стр. 44.

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 результатом 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 пометать 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. Корректура 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.

ОТКРЫТА ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛЫ АКАДЕМИИ НАУК СССР на 1955 год

Название журналов	Количество номеров в год	Годовая подписная цена в руб.	Название журналов	Количество номеров в год	Годовая подписная цена в руб.
Автоматика и телемеханика	6	54	Серия физическая	6	72
Акустический журнал	4	36	Известия Всесоюзного географического общества	6	54
Астрономический журнал	6	54	Исторический архив	6	90
Био химия	6	72	Коллоидный журнал	6	45
Ботанический журнал	6	90	Математический сборник	6	108
Вестник Академии наук СССР	12	96	Микробиология	6	72
Вестник древней истории	4	96	Почвоведение	12	108
Вопросы языкознания	6	72	Прикладная математика и механика	6	72
Доклады Академии наук СССР (без переплета)	36	360	Природа	12	84
Доклады Академии наук СССР (с 6 папками, коленкоровыми с тиснением)	36	384	Советское государство и право	8	120
Журнал аналитической химии	6	36	Советская этнография	4	72
Журнал высшей нервной деятельности имени И. П. Павлова	6	90	Успехи современной биологии	6	48
Журнал общей биологии	6	45	Успехи химии	8	64
Журнал общей химии	12	180	Физиологический журнал СССР имени И. М. Сеченова	6	72
Журнал прикладной химии	12	126	Физиология растений	6	54
Журнал технической физики	12	180	Реферативный журнал:		
Журнал физической химии	12	216	Астрономия и геодезия	12	91.20
Журнал экспериментальной и теоретической физики	12	144	" Указатель за 1953—1954 г.	1	32
Записки Всесоюзного минералогического общества	4	48	Биология	24	360
Зоологический журнал	6	135	Геология и география	12	240
Известия Академии наук СССР:			Математика	12	91.20
Отделение литературы и языка	6	54	" Указатель за 1953—1954 гг.	1	32
Отделение технических наук	12	180	Механика	12	91.20
Отделение химических наук	6	96	" Указатель за 1953—1954 гг.	1	32
Серия биологическая	6	72	Физика	12	240
Серия географическая	6	54	" Указатель за 1954 г.	1	78
Серия геологическая	6	90	Химия	24	432
Серия геофизическая	6	54	" Указатель за 1953—1954 гг.	2	100
Серия математическая	6	54			

ПОДПИСКА ПРИНИМАЕТСЯ

городскими и районными отделами «Союзпечати»,
отделениями и агентствами связи, магазинами «Академкнига»,
а также конторой «Академкнига» по адресу:
Москва, Пушкинская ул., д. 23.