

О РЕШЕНИИ ОСНОВНОГО УРАВНЕНИЯ КВАЗИРАВНОВЕСНОЙ ТЕОРИИ КРИСТАЛЛА

В работе [1] кристаллическое состояние описывалось с помощью одночастотных функций распределения молекул, каждая из которых движется в окрестности определенного узла кристаллической решетки. При этом одночастичная функция каждой молекулы отлична от нуля лишь в окрестности соответствующего узла и имеет вид

$$W_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = (2\pi m\theta)^{-3/2} e^{-\frac{p_i^2}{2m\theta}} \omega(\vec{r}_i - \vec{a}_i), \quad (1)$$

причем пространственная часть $\omega(\vec{q})$ одночастичной функции распределения удовлетворяет уравнению

$$\ln\{\lambda\omega(\vec{q})\} + \frac{1}{\theta} \int K(\vec{q} - \vec{q}') \omega(\vec{q}') d\vec{q}', \quad (2)$$

где

$$K(\vec{q} - \vec{q}') = \sum_{\vec{a}_j \neq 0} \Phi(|\vec{q} - \vec{q}' - \vec{a}_j|), \quad (3)$$

\vec{a}_j — координаты узлов кристаллической решетки, \vec{q} и \vec{q}' — отклонения молекул от узлов, λ — нормировочная константа. Уравнение (2) с ядром (3), в отличие от обычного уравнения самосогласованного поля, автоматически приводит к результатам, не содержащим «энергии самовоздействия» молекул.

Запишем приближенное решение уравнения (2) с учетом ангармоничности:

$$\omega(\vec{q}) = \frac{1}{\lambda} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \left[u_0 + \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{F_{\alpha^2} q_\alpha^2}{2!} + \frac{F_{\alpha^4} q_\alpha^4}{4!} \right) + \sum_{\alpha < \beta} \frac{6F_{\alpha^2\beta^2} q_\alpha^2 q_\beta^2}{4!} \right] \right\}, \quad (4)$$

где u_0 , F_{α^2} , $F_{\alpha^2\beta^2}$ — величины, которые подлежат определению. Подставляя (4) в (2), разлагая $K(\vec{q} - \vec{q}')$ в ряд Тэйлора, ограничиваясь членами не выше четвертого порядка и приравнявая члены, содержащие одинаковые степени \vec{q} , получим

$$F_{\alpha^2\beta^2} = K_{\alpha^2\beta^2}, \quad (5)$$

$$F_{\alpha^2} = K_{\alpha^2} + \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 K_{\alpha^2\beta^2} \overline{q_\beta^2}, \quad (6)$$

$$u_0 = K_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 K_{\alpha^2} \overline{q_\alpha^2} + \frac{1}{24} \sum_{\alpha=1}^3 K_{\alpha^4} \overline{q_\alpha^4} + \frac{1}{8} \sum_{\alpha \neq \beta} K_{\alpha^2\beta^2} q_\alpha^2 \overline{q_\alpha^2} \overline{q_\beta^2}, \quad (7)$$

где

$$K_0 = K(0), \quad K_{\alpha^2} \equiv \left. \frac{\partial^2 K(\vec{q})}{\partial q_\alpha^2} \right|_{\vec{q}=0},$$

$$K_{\alpha^2\beta^2} \equiv \left. \frac{\partial^4 K(\vec{q})}{\partial q_\alpha^2 \partial q_\beta^2} \right|_{\vec{q}=0},$$

$$\overline{q_\alpha^2} = \int q_\alpha^2 \omega(\vec{q}) d\vec{q}, \quad \overline{q_\alpha^2 q_\beta^2} = \int q_\alpha^2 q_\beta^2 \omega(\vec{q}) d\vec{q}. \quad (8)$$

Уравнения (6), (7) и (8) с учетом (4) и (5) представляют собой систему трансцендентных уравнений относительно u_0 и F_{α^2} . В случае слабой ангармоничности

$$\theta \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}} \ll 1 \quad (9)$$

находим с точностью до членов, линейных по $K_{\alpha^2\beta^2}$

$$u_0 = K_0 + \frac{3}{2} \theta - \frac{3}{8} \theta^2 \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}}, \quad (10)$$

$$F_{\alpha^2} = K_{\alpha^2} \left(1 + \frac{\theta}{2} \sum_{\beta=1}^3 \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}} \right)^1. \quad (11)$$

Аналогичным образом можно получить приближенные решения уравнения (2), содержащие члены более высокого порядка.

Удельная внутренняя энергия и удельная свободная энергия системы, одночастичные функции которой подчиняются уравнению (2), определяются (с точностью до членов, пропорциональных $K_{\alpha^2\beta^2}$) следующими выражениями:

$$\varepsilon = \frac{K_0}{2} + 3\theta - \frac{\theta^2}{4} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}}, \quad (12)$$

$$f = \frac{K_0}{2} - 3\theta \ln \theta + \frac{\theta}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \ln K_{\alpha^2} + \frac{\theta^2}{4} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}} - \frac{3}{2} \theta \ln(4\pi^2 m). \quad (13)$$

Величины K_0 , K_{α^2} , $K_{\alpha^2\beta^2}$ зависят от параметров кристаллической решетки, которые определяются условиями минимума соответствующего термодинамического потенциала. Если решетка имеет один параметр a (например, в случае кристалла с кубической симметрией), то он определяется следующим термическим уравнением:

$$\frac{a}{3v(a)} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial K_0}{\partial a} + \frac{\theta}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{K_{\alpha^2}} \frac{\partial K_{\alpha^2}}{\partial a} + \frac{\theta}{4} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{\partial}{\partial a} \frac{K_{\alpha^2\beta^2}}{K_{\alpha^2}K_{\beta^2}} \right) = -p, \quad (14)$$

где v — удельный объем, p — давление.

В случае одноатомной линейной цепочки, в которой взаимодействуют лишь ближайшие соседи

$$\begin{aligned} \Phi(q - q' + a) &= \Phi(a) + \Phi^I(a)(q - q') + \frac{1}{2!} \Phi^{II}(a)(q - q')^2 + \\ &+ \frac{1}{3!} \Phi^{III}(a)(q - q')^3 + \frac{1}{4!} \Phi^{IV}(a)(q - q')^4 + \dots, \end{aligned}$$

¹ При $K_{\alpha^2\beta^2} = 0$ имеем решения уравнения (2) в квазигармоническом приближении

$$\omega^{(qh)}(\vec{q}) = \frac{1}{\lambda} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[u_0^{(qh)} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 K_{\alpha^2} q_{\alpha}^2 \right] \right\}.$$

Такое решение уравнения (2) было получено в работе [1] при помощи метода, предложенного в работе [2] для уравнения самосогласованного поля. Однако получить тем методом решения с учетом ангармоничности невозможно вследствие расходимости используемых там итерационных последовательностей.

вместо (13) получим

$$f_{\text{л.ц.}} = \Phi(a) - \theta \ln \theta + \frac{\theta}{2} \ln \Phi^{\text{II}}(a) + \frac{\theta^2}{8} \frac{\Phi^{\text{IV}}(a)}{[\Phi^{\text{II}}(a)]^2} - \frac{\theta}{2} \ln(2\pi^2 m). \quad (15)$$

Как обычно, разлагая $\Phi(a)$, $\Phi^{\text{II}}(a)$ и т. д. в степенной ряд вблизи «положений покоя» \tilde{a} , определяемых условиями минимума потенциальной энергии, имеем

$$\Phi(a) \approx \tilde{\Phi} + \frac{1}{2} \tilde{\Phi}^{\text{I}}(a - \tilde{a})^2, \quad \Phi^{\text{II}}(a) \approx \tilde{\Phi}^{\text{II}} + \tilde{\Phi}^{\text{III}}(a - \tilde{a}), \dots,$$

где $\tilde{\Phi} \equiv \Phi(\tilde{a})$ и т. д. Подставляя последние соотношения в условие равновесия, которое в этом случае, как известно, имеет вид $(\partial f_{\text{л.ц.}} / \partial a)_{\theta} = F$ (где F — внешняя сила), пренебрегая членами, содержащими величины $\tilde{\Phi}^{\text{III}}$, $\tilde{\Phi}^{\text{IV}}$ и т. п., получим

$$a - \tilde{a} \equiv \delta a = -\frac{\theta}{2} \frac{\Phi^{\text{III}}}{[\tilde{\Phi}^{\text{II}}]^2} + \frac{F}{\tilde{\Phi}^{\text{II}}}. \quad (16)$$

Коэффициент теплового расширения линейной цепочки:

$$\alpha = \frac{1}{a} \frac{\partial(\delta a)}{\partial T} = -\frac{k\tilde{\Phi}^{\text{III}}}{2a(\tilde{\Phi}^{\text{II}})^2}, \quad (17)$$

где k — константа Больцмана. Формулы (16) и (17) совпадают с соответствующими выражениями, полученными общепринятым способом в [3]. Однако с помощью уравнения (2) вывод этих формул, по-видимому, будет более прост.

Теплоемкость линейной цепочки, вычисленная с помощью (15)

$$c_v = k - \frac{k^2 T}{4} \frac{\tilde{\Phi}^{\text{IV}}}{(\tilde{\Phi}^{\text{II}})^2},$$

отличается от соответствующей величины, приведенной в работе [3] на $\frac{k^2 T}{6} \frac{(\tilde{\Phi}^{\text{III}})^2}{(\tilde{\Phi}^{\text{II}})^3}$.

Таким образом, предположение о мультипликативности двухчастичных функций, которое принималось при выводе уравнения (2) в [1], влечет за собой пренебрежение величинами, пропорциональными $\frac{(\tilde{\Phi}^{\text{III}})^2}{(\tilde{\Phi}^{\text{II}})^3}$. Для учета этих величин необходимо уравнение для двухчастичных функций.

Автор выражает благодарность проф. Я. П. Терлецкому за предложенную тему и внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Терлецкий Я. П., Зубов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астроном., № 5, 53, 1968.
2. Базаров И. П. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астроном., № 5, 105, 1966.
3. Лейбфрид Г., Людвиг В. Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М., ИЛ, 1963.

Поступила в редакцию
28.8 1968 г.

Кафедра
теоретической физики

УДК 539.12.01

А. БАСЬЮНИ, Д. КУРДГЕЛАИДЗЕ

МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ И КОНСТАНТА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ БАРИОНОВ ОКТЕТА ($S=1/2^+$) И ДЕКУПЛЕТА ($S=3/2^+$)

Унитарная симметрия в теории элементарных частиц достигла значительных успехов. Удалось классифицировать основные барионы и мезоны, определить соотношения их констант сильной связи, получить определенные выражения для магнитных