*Весліник* московского университета

№ 2 - 1970

УДК 531.19

### И. Н. ЗРЯКОВ, А. Е. МОЗОЛЬКОВ

# ГРАНИЦЫ УСТОЙЧИВОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОДНОРОДНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СИСТЕМЕ ЧАСТИЦ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, ИМЕЮЩЕГО ЯМУ

Развито проведенное А. А. Власовым исследование системы частиц, потенциал взаимодействия которых имеет яму. Изучены условия, при которых осуществляется или нарушается равномерное распределение частиц в такой системе. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

В работах А. А. Власова [1, 2] исследована устойчивость равномерного распределения частиц в пространстве для монотонных сил взаимодействия, а также получено условие кристаллизации для сил, образующих потенциальную яму. В настоящей работе изучение устойчивости пространственно-однородного распределения частиц для сил, образующих потенциальную яму, получило дальнейшее развитие на основе анализа дисперсионного уравнения, а также с помощью метода годографа.

### § 1. Дисперсионное соотношение

Известно, что дисперсионное соотношение для уравнения Власова [1] имеет вид

$$1 = \frac{\sigma(k)}{m} \int_{(\infty)} \frac{\vec{k} \nabla_{\overrightarrow{v}} F_0(\vec{v})}{\vec{k} \vec{v} + \omega} d\vec{v}, \qquad (1)$$

$$F_0(\overline{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2\theta},$$
  
$$\sigma(k) = 4\pi \int_0^\infty K(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr,$$

n — число частиц в единице объема, K(r) — потенциал парных взаимодействий.

116

Выберем систему координат так, чтобы  $\vec{k} = \{k, 0, 0\}$ . Тогда соотношение (1) можно записать в виде

$$1 = \frac{\sigma(k)}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f_0(v)/\partial v}{v + \omega/k} \, dv, \qquad (2)$$

где

$$f_0(v) = n \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} e^{-mv^2/2\theta}.$$

Интеграл в (2) будет пониматься в смысле главного значения. Как видно будет из дальнейшего, особо важное значение имеет характер зависимости  $\sigma$  от волнового числа k. В нашем случае, когда потенциал взаимодействия имеет вид, показанный на рис. 1, формфактор  $\sigma(k)$  может зависеть от k так, как показано на рис. 2.

Такая зависимость о от k будет иметь место, например, для потенциала взаимодействия вида

$$K(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{a_0}{r} \right)^n - \left( \frac{a_0}{r} \right)^m \right], \qquad (3)$$

если при вычислении  $\sigma(k)$  ввести множитель  $e^{-kr/\theta}$ , учитывающий коллективные взаимодействия и зависимость эффективного объема частиц от температуры:

$$\sigma(k) = 4\pi \int_{0}^{\infty} K(r) e^{-k(r)/\theta} \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr.$$



### § 2. Волновые свойства системы многих частиц. Случай действительных ш

Вопрос об устойчивости изучаемой системы непосредственно связан с ее волновыми свойствами, на которых мы вкратце остановимся в этом параграфе.

Соотношение (2) можно записать так:

$$\frac{\theta}{2n} \frac{1}{\sigma(k)} = I(\Omega), \qquad (4)$$

где

$$I(\Omega) = -\int_{0}^{\infty} x e^{-x^{2}} \cos \Omega x dx,$$
$$\Omega = \sqrt{\frac{2m}{\theta}} \frac{\omega}{k}.$$

При достаточно высоких температурах будет существовать решение только в области  $0 < k < k_1$ . Дисперсионная кривая при  $\frac{\theta}{2n} - \frac{1}{\sigma(k)} < -\max I(\Omega)$  будет иметь вид «лепестков», показанных на рис. 3.

При повышении температуры «лепесток» вырождается в точку  $(k=0, \omega=0)$  и при  $\theta > 2n\sigma(0) \max I(\Omega)$  акустические колебания в среде невозможны.

При понижении температуры до значений  $\theta \leq -\sigma(k_0)n$  ( $\sigma(k_0) = \min \sigma(k)$ ) возникает второе решение уравнения (4), причем  $k_1 < k < k_2$ . Затем при  $\theta \rightarrow 0$  эта точка вырастает в кривую, как показано на рис. З пунктиром.

## § 3. Границы устойчивости. Мнимые ω

Решения уравнения (1) определяют собственные частоты колебаний в системе многих частиц. При некоторых условиях существуют только действительные ю, возможны, однако, и мнимые решения. Наличие таких решений в верхней полуплоскости комплексного переменно-



го Z указывает на неограниченное возрастание амплитуд собственных гармоник системы. В этом случае происходит нарушение равномерного распределения. Однако более детальное исследование этого процесса уже невозможно в рамках линейной теории.

В настоящей статье и выясняются условия, при которых появляются корни уравнения (1), лежащие в верхней полуплоскости комплексного переменного Z. Эти решения, как и любые решения (1), можно рассматривать как собственные значения оператора Власова, действие которого в фурье-представлении определяется следующим образом:

$$L\left[\varphi_{\vec{k}}\left(\vec{v}\right)\right] = \left[-iZ - i\bar{k}\,\overline{v} + \frac{i\bar{k}}{m}\,\sigma\left(k\right)\frac{\partial F_{0}}{\partial v}\int_{\infty}d\,\vec{v}\right]\varphi_{\vec{k}}\left(\overline{v}\right).$$

Оказывается, что при определенных условиях спектр собственных значений этого оператора может распространяться в верхнюю полуплоскость комплексного переменного.

Перепишем соотношение (4) для комплексных Z

$$\frac{\theta}{n\sigma(k)} = -\left(1 - 2Ze^{-Z^2}\int_{0}^{Z}e^{t^2}dt\right), \tag{5}$$

где

$$Z = \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \left( \frac{\omega}{k} + i \frac{\gamma}{k} \right). \tag{6}$$

Воспользуемся формулой, полученной в работе [3] для

$$Z = W(a + ib)$$
 ( в нашем случае  $W = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{m}{2\theta}}, a = \omega, b = \gamma$ ).

$$\int_{0}^{Z} e^{+x^{2}} dx = \left\{ a \int_{0}^{W} e^{(b^{2}-a^{2})y} \cos 2aby^{2} dy + b \int_{0}^{W} e^{(b^{2}-a^{2})y^{2}} \sin 2aby^{2} dy \right\} + i \left\{ b \int_{0}^{W} e^{(b^{2}-a^{2})y^{2}} \cos 2aby^{2} dy - a \int_{0}^{W} e^{(b^{2}-a^{2})y^{2}} \sin 2aby^{2} dy \right\}.$$
(7)

Подставляя (7) в (5) и учитывая (6), получим

 $\theta k^2$ 

 $2\theta$ 

$$\frac{\theta}{n\sigma(k)} = -1 + \frac{2}{k} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \cos \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_1 - \frac{2\gamma\omega}{\theta k^2} \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_1 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \sin \frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \exp \frac{m\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \exp \frac{m\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \exp \frac{m\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \exp \frac{m\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \exp \frac{m\omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 - 2\omega I_2 \right] + \frac{2}{2} \sqrt$$

$$+ 2 \frac{i}{k} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} \cos \frac{m\gamma \omega}{\theta k^2} e^{-m/2\theta k^2} (\omega^2 - \gamma^2) \left[ (\omega^2 - \gamma^2) I_2 + 2\gamma \omega I_1 \right] +$$

$$+2\frac{i}{k}\sqrt{\frac{m}{2\theta}}\sin\frac{m\gamma\omega}{\theta k^2}e^{-m/2\theta k^2}(\omega^2-\gamma^2)\left[(\gamma^2-\omega^2)I_1+2\gamma\omega I_2\right],\quad (8)$$

где

$$I_1 = \int_0^{\frac{1}{k}\sqrt{\frac{m}{2\theta}}} e^{-(\gamma^2 - \omega^2)y^2} \cos 2\gamma \omega y^2 dy,$$
$$I_2 = \int_0^{\frac{1}{k}\sqrt{\frac{m}{2\theta}}} e^{(\omega^2 - \gamma^2)y^2} \sin 2\gamma \omega y^2 dy.$$

Очевидно, для выполнения равенства (5) мы должны приравнять нулюмнимую часть выражения, стоящего в правой части этого равенства, так как  $\sigma(k)$  является действительной величиной; тогда получим

$$\cos\frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} \left[ \left( \omega^2 - \gamma^2 \right) I_2 + 2\gamma \omega I_1 \right] + \sin\frac{m\gamma\omega}{\theta k^2} \left[ \left( \gamma^2 - \omega^2 \right) I_1 + 2\gamma \omega I_2 \right] = 0.$$
(9)

Это уравнение, по крайней мере для малых  $\omega$  и  $\gamma$ , имеет следующие два решения:  $\omega = 0$  и  $\gamma \neq 0$ ;  $\gamma = 0$  и  $\omega \neq 0$ .

Докажем, что уравнение (9) не имеет решения при  $\omega \neq 0$  и  $\gamma \neq 0$ . Допустим обратное, т. е. пусть существует решение с  $\omega \neq 0$ ,  $\gamma \neq 0$ . Тогда, считая  $\omega$  малым, но не равным нулю, и ограничиваясь вторым порядком по  $\omega$ , уравнение (9) можно записать в виде

$$\left(1-\frac{m^2\gamma^2\omega^2}{2\theta^2k^4}\right)\left[\left(\omega^2-\gamma^2\right)I_2+2\gamma\omega I_1\right]+\frac{m\gamma\omega}{\thetak^2}\left[\left(\gamma^2-\omega^2\right)I_1+2\gamma\omega I_2\right]=0,$$

причем в интегралах I<sub>1</sub> и I<sub>2</sub> также учитываются члены до второго порядка по ω. После несложных преобразований получаем

$$\omega\gamma\left[\frac{1}{k}\sqrt{\frac{m}{2\theta}}e^{-\gamma^2 m/2\theta k^2} + \left(1 + \frac{m\gamma^2}{\theta k^2}\right)^{1/k}\int_{0}^{\frac{1}{k}\sqrt{\frac{m}{2\theta}}}e^{-\gamma^2 y^2}dy\right] = 0.$$

Так как в последнем уравнении выражение в квадратных скобках строго больше нуля, то или  $\omega = 0$  или  $\gamma = 0$ . Следовательно, наше предположение о существовании решения с  $\omega \neq 0$  и  $\gamma \neq 0$  неверно.

Таким образом, в указанном приближении уравнение (8) имеет либо действительные, либо чисто мнимые решения. Пусть γ=0, ω≠0. Тогда запишем

$$\frac{\theta}{\sigma(k) n} = -1 + \frac{2}{k} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} e^{-m\omega^2/2\theta k^2} \omega^2 \int_{0}^{\frac{1}{k}} e^{\omega^2 y^2}.$$

Из этого уравнения для малых  $\omega$  получим с точностью до членов порядка  $\omega^2$ 

$$\frac{\theta}{n\sigma(k)} = -1 + \frac{m}{\theta k^2} \omega^2$$
 или  $\omega = k \sqrt{\frac{\theta}{m}} \sqrt{1 + \frac{\theta}{n\sigma(k)}}.$ 

Пусть  $\gamma \neq 0$ ,  $\omega = 0$ . В этом случае уравнение (8) будет иметь вид

$$\frac{\theta}{n\sigma(k)} = -1 + \frac{2}{k} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} e^{m\gamma^2/2\theta k^2} (-\gamma)^{1/k} \int_0^{\frac{1}{k}} \sqrt{\frac{m}{2\theta}} e^{-\gamma^2 y^2} dy,$$

Отсюда для малых у получим с точностью до членов порядка у<sup>2</sup>

$$\frac{\theta}{n\sigma(k)} = -1 - \frac{m}{\theta k^2} \gamma^2$$
 или  $\gamma = k \sqrt{\frac{\theta}{m}} \sqrt{-1 + \frac{\theta}{n\sigma(k)}}.$ 

Итак, уравнение (5) имеет действительные решения при  $\frac{1}{\sigma(k)} > -\frac{n}{\theta}$  и чисто мнимые решения при  $\frac{1}{\sigma(k)} < -\frac{n}{\theta}$ , что хорошо согласуется с явлением нарушения при  $\theta = -\sigma(k_0)n$  пространственнооднородного распределения, установленным в § 2.

Границы устойчивости системы можно определить, не прибегая к непосредственным вычислениям интегралов в (8). Исследование можно проводить, основываясь на методе годографа [4, 5], который заключается в следующем. Мы рассматриваем (2) как функцию произвольной комплексной величины Z

$$\varepsilon(Z) = 1 - \frac{\sigma(k)}{m} \int_{\Gamma} \frac{\partial f_0(v)/\partial v}{v + Z/k} \, dv.$$
(10)

Нули функции  $\varepsilon(Z)$  определяют частоты колебаний в системе для заданного k. Из теории аналитических функций известно, что разность числа нулей и числа полюсов функции  $\varepsilon(Z)$  внутри контура G, где эта функция определена, дается выражением

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_{G} dz \, \frac{\varepsilon'(Z)}{\varepsilon(Z)}.$$
 (11)

Контур G выбираем так, как указано на рис. 4. Используя аналитичность интеграла Коши в верхней полуплоскости (функция  $\varepsilon(Z)$  не имеет полюсов внутри контура G) для числа нулей этой функции в верхней полуплоскости, получим

$$N_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\varepsilon'(Z)}{\varepsilon(Z)} dZ.$$
 (12)

Таким образом, если  $N_0 \neq 0$ , то в верхней полуплоскости должен существовать по крайней мере один корень уравнения (2). Выражение (12) можно переписать в виде

$$N_0 = \frac{1}{2\pi i} \Delta_G \ln \varepsilon (Z) = \frac{1}{2\pi} \Delta_G \arg \varepsilon (Z), \qquad (13)$$

где символ  $\Delta_G$  означает приращение какой-либо функции от Z при обходе переменной Z контура G. Как видно из (13),  $N_0 \neq 0$  в том случае, если годограф функции  $\varepsilon(Z)$  хотя бы раз обходит начало координат.



Годографом мы называем кривую, которую вычерчивает конец вектора, направленного в точку  $\varepsilon(Z)$  на плоскости комплексного переменного є при движении Z по контуру G. Значение функции є при Z, находящемся на полуокружности, как известно из теории интегралов Коши, равно единице. При стремлении же Z к действительной оси:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\sigma(k)}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f'_0(v)}{v + \omega/k} dv + i\pi \frac{\sigma(k)}{m} f'_0\left(\frac{\omega}{k}\right), \quad (14)$$

как это следует из формулы Племеля. Интеграл здесь понимается в смысле главного значения,  $\omega = \operatorname{Re} Z$ .

Годограф пересекает второй раз действительную ось в точке, в которой распределение  $f_0(v)$  имеет максимум, т. е. при  $\omega/k=0$ . Это пересечение происходит в точке с координатами

$$\left[1+n\frac{\sigma(k)}{m}\left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2}\frac{m}{\theta}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{ve^{-mv^2/2\theta}}{v}dv,0\right]=\left[1+\frac{n\sigma(k)}{\theta},0\right].$$

В том случае, когда  $1 + \frac{n}{\theta} \sigma(k) < 0$ , контур обходит начало координат, что, как указывалось выше, ведет к существованию корней уравнения (2) в верхней полуплоскости.

Итак при температурах  $\theta > -n\sigma(k_0)$  равномерное распределение частиц в системе с потенциалом взаимодействия, имеющим яму, абсо-

лютно устойчиво по отношению к любым возмущениям. Далее, при температурах и плотностях, удовлетворяющих соотношению  $\theta < -n\sigma(k_0)$ , наблюдается нарушение равномерного распределения.

Явление возникновения бесконечно возрастающих (неустойчивых) мод наблюдается и в системе с кулоновским взаимодействием (плазме). Однако в этом случае неустойчивость вызывается особенностями начального распределения частиц в пространстве скоростей. В нашем же случае экспоненциально растущие моды могут появиться даже для максвелловского распределения по скоростям благодаря изменению термодинамических параметров и свойствам потенциала парного взаимодействия.

## § 4. Затухание Ландау

До сих пор при анализе дисперсионного соотношения интеграл, входящий в него, мы понимали в смысле главного значения. Рассматривая второй тип решений, соответствующий задаче Коши, можно получить затухание Ландау. Для этого необходимо выбрать контур интегрирования так, как выбирал Ландау [6]. Проводя аналогичные выкладки для малых k, получим декремент затухания

$$\gamma = \frac{kn^2\sigma^2(k)}{2\theta^{3/2}} \left(\frac{\pi}{2m}\right)^{1/2} e^{-n\sigma(k)/2\theta},$$

 $\gamma$  для больших k определится из соотношения

$$\left[1+\frac{\theta}{n} \frac{1}{\sigma(k)}\right]e^{-m\gamma^2/2\theta k^2}=-\alpha \frac{\gamma}{k},$$

 $\alpha = \frac{\sqrt{2\pi} n\sigma(k) k^2}{m} \left(\frac{m}{\theta}\right)^{3/2}.$ 

Как видно, затухание существует только при  $\theta > -n\sigma(k)$ . В противном случае, как уже указывалось, наблюдается возрастание амплитуды.

### § 5. Теория кривой плавления

Для большинства веществ существует эмпирическое уравнение Симона, дающее уравнение кривой плавления на  $p, \theta$  — плоскости системы в виде [7]

$$\frac{p}{a} = \left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^c - 1, \tag{15}$$

где *а* и *с* — постоянные,  $\theta_0$  — температура плавления при атмосферном. давлении.

Уравнение Симона описывает линию равновесного фазового перехода жидкость — кристалл. Мы попытаемся получить приближенное уравнение для соответствующей линии абсолютного предела устойчивости жидкости.

Такое решение задачи о пределе устойчивости системы с потенциалом взаимодействия частиц вида (3) затруднительно. Но можно приближенно решить эту задачу, если учесть в (3) только отталкивание, а затем ввести поправку на притяжение. Это оправдано при высоких температурах, когда кристаллизация происходит при очень больших. давлениях.

122

где

В этом случае выражение для  $\sigma(k)$  примет вид

$$\sigma(k) = 4\pi \int_{0}^{\infty} 4\varepsilon \left(\frac{a_0}{r}\right)^n e^{-4\varepsilon/\theta} \left(\frac{a_0}{r}\right)^n \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr.$$
(16)

Переходя к безразмерной переменной  $r \rightarrow r' = \frac{r}{a_0} \left(\frac{\theta}{4\varepsilon}\right)^{1/n}$ , получим

$$\sigma(k) = 16\pi\varepsilon a_0^3 \left(\frac{\theta}{4\varepsilon}\right)^{1-3/n} \int_0^\infty \frac{1}{(r')^{n-2}} e^{-1/(r')^n} \frac{\sin\left[ka_0r'\left(\frac{4\varepsilon}{\theta}\right)^{1/n}\right]}{ka_0r'\left(\frac{4\varepsilon}{\theta}\right)^{1/n}} dr'.$$

Для высоких температур синус можно разложить в ряд, и после интегрирования, ограничиваясь четырьмя первыми членами разложения, получим

$$\sigma(k) = 16\pi\epsilon a_0^3 \left(\frac{\theta}{4\epsilon}\right)^{1-3/n} \left[ I_1 - \frac{1}{3!} k^2 a_0^2 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{2/n} I_2 + \frac{1}{5!} k^4 a_0^4 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{4/n} I_3 - \frac{1}{7!} k^6 a_0^6 \left(\frac{4\epsilon}{\theta}\right)^{6/n} I_4 \right], \qquad (17)$$

где

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

Процедуру разложения синуса в ряд под знаком интеграла следует понимать в следующем предельном смысле. Мы ограничиваем область интегрирования некоторым R, т. е. считаем, что  $0 \le r' \le R$ . На этом отрезке разлагаем синус в ряд и производим интегрирование, после чего в полученном выражении переходим к пределу  $R \to \infty$ . Критерий устойчивости можно записать в виде системы уравнений

$$\frac{\partial V}{N} = -\sigma(k), \qquad (18) \qquad \frac{\partial \sigma(k)}{\partial k} = 0, \qquad (19)$$

где V — объем системы, N — полное число частиц. Определяя  $k_0$  из уравнения (19) с помощью (17) и подставляя его в уравнение (18), получим выражение для предельного объема

$$V = \frac{N}{\theta} \frac{16\pi\varepsilon a_0^3 b}{n} \left(\frac{\theta}{4\varepsilon}\right)^{1-3/n},$$
(20)

где

$$b = \frac{5}{6} \frac{\Gamma^2\left(\frac{n-5}{n}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-7}{n}\right)} + \frac{25}{126} \frac{\Gamma^3\left(\frac{n-5}{n}\right)}{\Gamma^3\left(\frac{n-7}{n}\right)} \Gamma\left(\frac{n-9}{n}\right) - \Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right).$$

Для получения линии потери устойчивости в переменных *р* и 9 надо иметь уравнение состояния. Определим свободную энергию одной частицы с помощью уравнения

$$\int_{(\infty)} \int_{V} \exp\left\{\frac{\psi - H}{\theta}\right\} d\vec{r} d\vec{p} = 1, \qquad (21)$$

где

 $H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}). \tag{22}$ 

Запишем

$$U(\vec{r}) = \int_{V} k(|\vec{r} - \vec{r'}|) \exp\left\{-\frac{k(|\vec{r} - \vec{r'}|)}{\theta}\right\} \rho(\vec{r'}) d\vec{r'} = \frac{N\sigma(0)}{V}.$$

Из (21) получим

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

И

$$p = -\frac{\partial \Psi}{\partial V} = \frac{N\theta}{V} + \frac{1}{2} \frac{N^2 \sigma(0)}{V^2}.$$
 (23)

(При интегрировании по  $\vec{r}$  перед  $U(\bar{r})$  в гамильтониане (22) нужно писать множитель  $\frac{1}{2}$ .)

Подставляя выражение для предельного объема (20) в уравнение состояния (23), получим

$$\rho = \frac{\left[\Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right) + 2b\right]n\theta_0^2 \left(\frac{4\varepsilon}{\theta}\right)^{1-3/n}}{32\pi a_0^3 b^2} \left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^{1+3/n}$$

К этому выражению следует добавить поправку на силы притяжения частиц:

$$\rho = \frac{\left[\Gamma\left(\frac{n-3}{n}\right)+2b\right]n\theta_0^2\left(\frac{4\varepsilon}{\theta}\right)^{1-3/n}}{32\pi a_0^3 b^2} \left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^{1+3/n} - a.$$
(24)

Сравнивая уравнение (24) с эмпирической кривой Симона (15), получим c = 1 + 3/n,

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

Заметим, что коэффициент пропорциональности между p и  $\theta^{1+3/n}$  не зависит от  $\theta_0$ , и температура  $\theta_0$  введена для удобства сравнения с экспериментом.

Так как для благородных газов n=10-12, а экспериментальное значение  $c \sim 1,5-1,6$  [8], то для константы c мы имеем довольно хорошее согласие с опытом. Подставляя в выражение для a известные значения констант  $\theta$  и  $\varepsilon$ , для n=12 [9] можно провести сравнение с экспериментальными результатами [8], приведенное в таблице.

Вещество	Ar	Kr	Xe	Ne	N₂
a <sub>reop</sub>	2644	2974	3053	1398	1571
a <sub>эксп</sub>	2087	2345	2576	1024	1586

Несколько завышенные значения а для благородных газов могут быть объяснены различием в линиях равновесного фазового перехода и абсолютного предела устойчивости.

В заключение следует отметить, что на основании уравнения Власова получен критерий устойчивости пространственно-однородного распределения. Этот критерий, выраженный в термодинамических переменных p и  $\theta$ , представляет собой предельную линию устойчивости однородной фазы. Отождествление этой линии с кривой фазового равновесия жидкость — кристалл приводит к хорошему согласию с экспериментом.

Авторы выражают глубокую признательность проф. А. А. Власову за предложенную тему и ценные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. Теория многих частиц. М., ГИТТЛ, 1950.

2. Власов А. А. Статистические функции распределения. М., «Наука», 1966.

 $\int e^{-x^2} dx$ .... Mapleton House, Brooklyn, 3. Rosser J. B. Theory and application of

4. Герценштейн М. Е. ЖЭТФ, 23, 669, 1952.

5. Балеску Р. Станистичская механика заряженных частиц. М., «Мир», 1967. 6. Ландау Л. Д. ЖЭТФ, 16, 574, 1946. 7. Simon F. E. Gatzer G. Z. anorg. u. allgem. Chem., 178, 309, 1929. 8. Babb S. E. Rev. Mod. Phys., 35, 400, 1963.

9. Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.

Поступила в редакцию 20.9 1968 г.

Кафедра теоретической физики

N. Y., 1948.