циевом полом катоде при наибольших исследуемых токах степень ионизации стронция составляет 10^{-1}, в то время как степень ионизации гелия — 10^{-4}.

Такой результат можно объяснить тем, что в исследуемых условиях средняя энергия электронов близка к энергиям ионизации атомов металлов. Так, средняя энергия $\bar{\varepsilon}$ в гелиевом разряде была порядка 4—6 эВ, а в аргоновом $\bar{\varepsilon}=1$—1,5 эВ; как показало исследование скоростей образования ионов, основной вклад в них вносят прямая и ступенчатая ионизации электронами.

Кроме того, сечения прямой ионизации Sr и Ba [6] в 4 раза больше, чем у аргона [7], и в 30 раз больше сечения ионизации гелия [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Латуш Е. Л., Сэм М. Ф. В кн.: Квантовая электроника, № 3 (15). М.: Сов. радио, 1973, с. 66. [2] Исаев А. А., Казарян М. А., Петраш Г. Г. Квантовая электроника, 1973, №4 (16), с. 123. [3] Мак-Даниель И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976, с. 36. [4] Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966, с. 342. [5] Смирнов Б. М. Ионы и возбужденные атомы в плазме. М.: Атомиздат, 1974, с. 230. [6] Вайнштейн Л. А., Очкур В. И., Раховский В. И., Степанов А. М. ЖЭТФ, 1971, **61**, № 2, с. 510. [7] Rapp D., Englander-Golden P. J. Chem. Phys., 1965, **43**, N 5, p. 1464. [8] Gryzinski M. Phys. Rev. 1965, **138A**, N 2, p. 336.

Поступила в редакцию
22.04.80

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 2

УДК 539.2

РЕШЕНИЕ ЦЕПОЧКИ УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ КРИСТАЛЛА

И. П. Базаров, П. Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

Полученная в монографии Н. Н. Боголюбова [1] цепочка уравнений для равновесных функций распределения решена там для обычного газа с короткодействующими силами взаимодействия между атомами и для системы частиц с дальнодействующими (кулоновскими) силами взаимодействия путем разложения функций распределения по степеням соответствующего малого параметра. В настоящей работе мы найдем решение цепочки уравнений Боголюбова для кристалла разложением функций распределения по степеням установленного в работе [2] малого вплоть до температур плавления «кристаллического» параметра — отношению объема локализации атома к объему элементарной ячейки или связанного с этой величиной отношения куба среднеквадратичного смещения к объему элементарной ячейки.

Будем исходить из цепочки уравнений Боголюбова для кристалла, записанной в форме [2]:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial q_1^\alpha} + \frac{1}{\Theta} \frac{\partial \bar{u}_s}{\partial q_1^\alpha} \rho_s + \\ + \frac{1}{\Theta} \sum_{i \neq \overline{1,s}} \int_{v_i} \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_i|)}{\partial q_1^\alpha} [\rho_{s+1}(q_1, \ldots, q_i) - \rho_s(q_1, \ldots, q_s) \rho_1(q_i)] \, dq_i = 0, \tag{1}$$

где $\rho_s(q_1, \ldots, q_s)$ — плотность вероятности того, что при наблюдении за системой из N частиц одна из них (любая) окажется около q_1 в dq_1, другая — около q_2 в dq_2, ..., s-я — около q_s в dq_s;

$$\overline{U}_s = \sum_{1\leqslant i<j\leqslant s} (\Phi(|q_i - q_j|) - \Phi(|q_i^0 - q_j^0|)) +$$
$$+ \sum_{\substack{1\leqslant i\leqslant s\\ j\neq \overline{1,s}}} \int_{v_i} (\Phi(|q_i - q_j|) - \Phi(|q_i^0 - q_j|))\rho_1(q_j)\,dq_j =$$
$$= \sum_{1\leqslant i<j\leqslant s} (\Phi(|q_i - q_j|) - \Phi(|q_i^0 - q_j^0|)) +$$
$$+ \sum_{\substack{1\leqslant i\leqslant s\\ j\neq \overline{1,s}}} (\Phi(|q_i - \overline{q}_j|) - \Phi(|q_i^0 - \overline{q}_j|)), \tag{2}$$

$\Phi(|q_i - q_j|)$ — двухчастичный потенциал, $\Theta = kT$, q_i^0 — положение равновесия i-й частицы, и интегрирование ведется по элементарной ячейке.

Решение цепочки уравнений ищем в виде ряда

$$\rho_s = \rho^0{}_s + \rho^1{}_s + \rho^2{}_s + \ldots, \tag{3}$$

где $\rho^i{}_s$ пропорционально i-й степени малого параметра. Подставим (3) в (1) и приравняем члены одного порядка. Будем иметь:

$$\frac{\partial \rho_s^0}{\partial q_1^\alpha} + \frac{1}{\Theta}\frac{\partial \overline{U}_s}{\partial q_1^\alpha}\rho_s^0 = 0,$$
$$\frac{\partial \rho_s^1}{\partial q_1^\alpha} + \frac{1}{\Theta}\frac{\partial \overline{U}_s}{\partial q_1^\alpha}\rho_s^1 + \sum_{i\neq \overline{1,s}} \int_{v_i} \frac{\partial \varphi_{1i}}{\partial q_1^\alpha}\rho_{s+1}^0(q_1, \ldots, q_i)\,dq_i = 0, \tag{4}$$

где

$$\varphi_{1i} = \Phi(|q_i - q_j|) - \Phi(|q_i^0 - q_j^0|) - \Phi(|q_i - \overline{q}_j|) +$$
$$+ \Phi(|q_i^0 - \overline{q}_j|) - \Phi(|\overline{q}_i - q_j|) + \Phi(|\overline{q}_i - q_j^0|).$$

Граничные условия:

$$\rho_s^0(q_1, \ldots, q_s) - \prod_{1\leqslant i<s} \rho_1^0(q_i) \to 0, \quad |q_i - q_j| \to \infty,$$
$$\rho_s^1(q_1, \ldots, q_s) - \sum_{1\leqslant i\leqslant s} \rho_1^1(q_i) \prod_{\substack{1\leqslant i\leqslant s\\ j\neq i}} \rho_1^0(q_j) \to 0, \tag{5}$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Условия нормировки:

$$\int_v \rho_1^0(q)\,dq = 1, \quad \int_v \rho_1^1(q)\,dq = 0, \ \ldots \tag{6}$$

Положим

$$\rho^0{}_s = C^0{}_s(q_1, \ldots, q_s)\exp[-\overline{U}_s/\Theta].$$

Тогда из уравнений (4) следует, что

$$\frac{\partial C_s^0}{\partial q_1^\alpha} = 0,$$

т. е. $C^0{}_s$ не зависит от q_1. Но так как $C^0{}_s$ симметрична по отношению к $q_1, \ldots, q_s$, отсюда следует, что $C^0{}_s = \text{const}$, а условия нормировки (6) дадут

$$C_s^0 = (C_1^0)^s,$$

$$(C_1^0)^{-1} = \int_v \exp\Big[-\sum_{i\neq 1} (\Phi(|q_1 - \bar{q}_i|) - \Phi(|q_1^0 - \bar{q}_i|))/\Theta\Big]\, dq_1. \qquad (7)$$

Таким образом,

$$\rho^0{}_s = (C^0{}_1)^s \exp[-\bar{U}_s/\Theta]. \qquad (8)$$

Возьмем теперь второе из уравнений (4) и запишем его в виде

$$\frac{\partial \rho_s^1}{\partial q_1^\alpha} + \frac{1}{\Theta}\frac{\partial \bar{U}_s}{\partial q_1^\alpha}\rho_s^1 +$$

$$+ \frac{1}{\Theta}\sum_{i\neq \overline{1,s}} \int_{v_i} \frac{\partial \varphi_{1i}}{\partial q_1^\alpha} (C_1^0)^{s+1} \exp[-\bar{U}_{s+1}/\Theta]\, dq_i = 0.$$

Замечаем, что

$$\frac{C_1^0}{\Theta}\frac{\partial \varphi_{1i}}{\partial q_1^\alpha} \exp[-\bar{U}_{s+1}/\Theta] =$$

$$= \frac{1}{\Theta}\frac{\partial \varphi_{1i}}{\partial q_1^\alpha} \exp[-\bar{U}_s/\Theta] \exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s} \varphi_{ki}/\Theta\Big] \rho_1^0(q_i) =$$

$$= -\exp[-\bar{U}_s/\Theta] \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s} \varphi_{ki}/\Theta\Big] \rho_1^0(q_i) =$$

$$= -\exp[-\bar{U}_s/\Theta]\, \rho_1^0(q_i) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \prod_{1\leqslant k\leqslant s} (1 + f_{ki}),$$

где для сокращения положено

$$f_{ki} = \exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1.$$

Здесь мы учли, что

$$\exp[-\bar{U}_{s+1}/\Theta] = \exp[-\bar{U}_s/\Theta] \exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s} \varphi_{ki}/\Theta\Big] \times$$

$$\times \exp\Big[-\sum_{l\neq i} (\Phi(|q_l - q_i|) - \Phi(|q_l^0 - \bar{q}_i|))/\Theta\Big].$$

Для короткодействующего потенциала между частицами в кристалле $\Phi(r)$ имеет место быстрое убывание с возрастанием $|q_i - q_j|$, так что рассматриваемые интегралы являются абсолютно сходящимися и можно записать

$$\frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int_v \Big[1 + \sum_{1\leqslant k\leqslant s} \overline{(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1)}\Big] \rho_1^0(q_i)\, dq_i = 0,$$

где

$$\overline{\exp[-\varphi_{ki}/\Theta]} = \int_v \exp[-\varphi_{ki}/\Theta]\, \rho_1^0(q_k)\, dq_k. \qquad (9)$$

Следовательно,

$$\frac{\partial \rho_s^1}{\partial q_1^\alpha} + \frac{\rho_s^1}{\Theta} \frac{\partial \overline{U}_s}{\partial q_1^\alpha} = \exp[-\overline{U}_s/\Theta] (C_1^0)^s \times$$

$$\times \sum_{i \neq \overline{1,s}} \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int_{v_i} \left\{ \prod_{1 \leqslant k \leqslant s} \left(1 + f_{ki} \right) - 1 - \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} (\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1) \right) \right\} \rho_1^0(q_i)\, dq_i.$$

Положим здесь снова

$$\rho^1{}_s = (C^0{}_1)^s \exp[-\overline{U}_s/\Theta] C^1{}_s(q_1, \ldots, q_s), \tag{10}$$

тогда получим

$$\frac{\partial C_s^1}{\partial q_1^\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \sum_{i = \overline{1,s}} \int_{v_i} \left\{ \prod_{1 \leqslant k \leqslant s} (1 + f_{ki}) - 1 - \right.$$

$$\left. - \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} (\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1) \right\} \rho_1^0(q_i)\, dq_i.$$

Поскольку $C^1{}_s$ должна быть симметричной по отношению к аргументам $q_1, \ldots, q_s$, справедливо

$$C_s^1 = \sum_{i \neq \overline{1,s}} \int_{v_i} \left\{ \prod_{1 \leqslant k \leqslant s} (1 + f_{ki}) - 1 - \right.$$

$$\left. - \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} (\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1) \right\} \rho_1^0(q_i)\, dq_i + k_s,$$

$$k_s = \text{const},$$

Но ввиду быстрого убывания функции f_{ki} при $|q_i - q_k| \to \infty$

$$\int_{v_i} \left\{ \prod_{1 \leqslant k \leqslant s} (1 + f_{ki}) - 1 - \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} \overline{(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1)} \right\} \rho_1^0(q_i)\, dq_i \to 0,$$

когда все $|q_i - q_j| \to \infty$, и поэтому, учитывая (5), (6), (10), находим, что $k_s = 0$. Итак,

$$\rho_s^1 = (C_1^0)^s \exp[-\overline{U}_s/\Theta] \sum_{i \neq \overline{1,s}} \int_{v_i} \left\{ \prod_{1 \leqslant k \leqslant s} (1 + f_{ki}) - 1 - \right.$$

$$\left. - \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} \overline{(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta] - 1)} \right\} \rho_1^0(q_i)\, dq_i. \tag{11}$$

Аналогичным образом можно получить члены второго порядка малости. В этом случае с учетом найденных выражений для ρ_s имеем:

$$\rho_s = (C_1^0)^s \exp[-\overline{U}_s/\Theta] \left\{ 1 + \int_v K_1(q_1, \ldots, q_s, q_{s+1})\, \rho_1^0(q_{s+1})\, dq_{s+1} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \int_v \int_v K_2(q_1, \ldots, q_s, q_{s+1}, q_{s+2})\, \rho_1^0(q_{s+1})\, \rho_1^0(q_{s+2})\, dq_{s+1}\, dq_{s+2} + \ldots \right\}$$

$$(s = 1, 2, \ldots), \tag{12}$$

где

$$K_1(q_1, \ldots, q_s, q_{s+1}) = \sum_{i \neq \overline{1,s}} \left\{ \exp\left[- \sum_{1 \leqslant k \leqslant s} \varphi_{ki}/\Theta \right] - \right.$$

$$-1-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}\overline{(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta]-1)}\Big\},$$

$$K_2(q_1,\ \ldots,\ q_s,\ q_{s+1},\ q_{s+2})=$$

$$=\sum_{i\neq j\neq\overline{1,s}}\Big\{\exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}(\varphi_{ki}+\varphi_{kj})/\Theta-\varphi_{ij}/\Theta\Big]-1-$$

$$-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}(\exp[-(\varphi_{ki}+\varphi_{kj})/\Theta]-1)\exp[-\varphi_{ij}/\Theta]-$$

$$-\Big[\exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}\varphi_{ki}/\Theta\Big]-1-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}[\exp[-\varphi_{ki}/\Theta]-1]]\times \tag{13}$$

$$\times\Big[\sum_{1\leqslant k\leqslant s}(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta]-1)+\overline{\exp[-\varphi_{ij}/\Theta]}\Big]-$$

$$-\Big[\exp\Big[-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}\varphi_{kj}/\Theta\Big]-1-\sum_{1\leqslant k\leqslant s}\overline{(\exp[-\varphi_{kj}/\Theta]-1)}\Big]\times$$

$$\times\Big[\sum_{1\leqslant k\leqslant s}\overline{(\exp[-\varphi_{ki}/\Theta]}\Big]-1)+\overline{\exp[-\varphi_{ji}/\Theta]}\Big]\Big\}.$$

В (13)

$$q_i=a_i+q_{s+1},$$

$$q_j=a_j+q_{s+2},$$

где a_i — радиус-вектор i-го узла решетки.

Таким образом, получено решение цепочки уравнений Боголюбова для кристалла в виде разложения функций распределения по степени «кристаллического» малого параметра [2]. По своему виду найденное разложение для кристалла совпадает с разложением функций распределения по степеням плотности для газа [1]. Отличием является то, что одночастичная функция распределения не постоянна, а периодична с периодом решетки. Нулевым приближением для нее будет приближение самосогласованного поля. Первое приближение пропорционально малому параметру, второе — квадрату этого параметра и т. д. В силу того что мы получили сходящийся ряд, нулевое приближение выбрано правильно и приближение самосогласованного поля хорошо описывает кристалл. Найденные функции распределения позволяют построить термодинамику кристалла. Для определения термического и калорического уравнений состояния системы с двухчастичным взаимодействием достаточно знания бинарной функции распределения. В последующей работе будут получены уравнения состояния и обсуждены вопросы, связанные с выполнением термодинамических соотношений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л.: ГИТЛ, 1946. [2] Базаров И. П., Николаев П. Н. О малом параметре в статистической теории кристаллического состояния. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1982, 23, № 1, с. 69.

Поступила в редакцию
26.05.80