$T_e \geqslant m_e c^2$. Так как в (5) $\operatorname{Im} Q > 0$, то из решения уравнения (4) следует, что возбуждаются волны с частотой меньше ω_0, а волны с большей частотой затухают за счет взаимодействия резонансных электронов с биениями на частоте ω. Максимальный инкремент при этом

$$\gamma = \omega_p \frac{3\pi}{4} \alpha^{-3/2} (\ln 1/\alpha)^{-5/2} \left(\frac{eE_0}{m_e c \omega_p} \right)^2$$

существенно больше, чем в длинноволновой области спектра [5], где

$$\gamma \sim \omega_p (k_0 r_D) \alpha \left(\frac{eE_0}{m_e c \omega_p} \right)^2.$$

Из анализа этих результатов и результатов [3] следует вывод, что в релятивистской плазме модуляционная неустойчивость имеет место только в области волновых векторов k_0, максимальное значение которых меньше $\bar{k}$. В этой области ленгмюровские волны имеют сверхсветовые фазовые скорости и не взаимодействуют резонансно с частицами плазмы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Силин В. П., Урсов В. Н. Кр. сообщ. по физике ФИАН СССР, 1982, № 12, с. 53. [2] Кузьменков Л. С., Ситнов М. И. Изв. вузов. Физика, 1982, № 9, с. 57. [3] Котов В. Б., Кузьменков Л. С., Трубачев О. О. ЖЭТФ, 1984, 87, с. 822. [4] Ситенко А. Г. Флуктуации и нелинейное взаимодействие волн в плазме. Киев, 1977, с. 104. [5] Кузьменков Л. С., Трубачев О. О. Изв. вузов. Физика, 1982, № 2, с. 53.

Поступила в редакцию
18.09.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1986, Т. 27, № 4

УДК 536.71

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ И МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

И. П. Базаров, П. Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

В статистической физике определение уравнений состояния сводится часто к вычислению термодинамического потенциала, а затем на его основе определяются путем дифференцирования остальные характеристики.

В общем случае вычисление термодинамического потенциала сложно из-за трудностей определения статистической суммы системы N частиц. В настоящее время развит ряд методов вычисления статистической суммы для предельных случаев поведения макроскопического параметра b (температуры, плотности и т. д.): $b \to b_1$, $b \to b_2$.

Возникает естественная задача определения функции при произвольном значении b по имеющейся информации [1]. Данная задача относится к так называемым некорректным задачам, к которым относится и частный случай рассматриваемой проблемы — задача аналитического продолжения функции, известной на части области, на всю область.

Обратимся теперь к постановке задачи. Решение для искомой термодинамической функции $f(b)$ (термодинамический потенциал и т. д.) мы будем искать в виде ряда Фурье по заданной ортонормированной системе функций $\{\varphi_n(b)\}$ с весом $\rho(b)$

$$f(b) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(b).$$

На основе имеющихся сведений о поведении функции $f(b)$ мы имеем возможность найти лишь приближенные значения $\tilde{c}_n$. Возникает задача суммирования рядов Фурье с приближенными коэффициентами.

Задача суммирования рядов Фурье не является устойчивой в метрике L_2 к малым изменениям коэффициентов Фурье, если уклонение суммы оценивать в метрике

C (что обычно делается в физических задачах), и задача, таким образом, является некорректно поставленной.

Возьмем в качестве стабилизирующего функционала, согласно [2], некоторый функционал вида

$$\Omega[f] = \sum_{n=1}^{\infty} f_n^2 \xi_n,$$

где f_n — коэффициенты Фурье функции $f(b)$ по полной ортонормированной системе функций $\{\varphi_n(b)\}$ (с весом $\rho(b) \geqslant 0$), $\{\xi_n\}$ — последовательность положительных чисел, порядок роста которых при $n \to \infty$ не ниже, чем $n^{2+\varepsilon}$ ($\varepsilon \geqslant 0$).

Задачу суммирования ряда Фурье функции $f(b)$ можно рассматривать как задачу решения операторного уравнения

$$Af = u,$$

где $u = \{a_n\}$ — элемент пространства L_2, определяемый коэффициентами разложения в ряд Фурье функции из множества F; A — оператор из C_D на L_2; C_D — пространство непрерывных в конечной замкнутой области $\overline{D}$ функций с метрикой C. Поэтому ищем приближение функции $\tilde{f}(b)$ методом регуляризации.

Рассмотрим функционал

$$M^{\alpha}[u_\delta, f] = \rho^2_{L_2}(Af, u_\delta) + \alpha\Omega[f], \tag{1}$$

где α — параметр регуляризации, u_δ — элемент пространства L_2, определяемый приближенно с точностью δ коэффициентами Фурье искомой функции. Запишем (1) в виде

$$M^{\alpha}[u_\delta, f] = \sum_{n=1}^{\infty} (f_n - c_n)^2 + \alpha \sum_{n=1}^{\infty} f_n^2 \xi_n. \tag{2}$$

Согласно известным теоремам, существует функция $\tilde{f}_\alpha(b)$, реализующая минимум функционала $M^\alpha[u_\delta, f]$. Эту функцию мы и берем в качестве приближения функции $f(b)$.

Из условия равенства нулю частных производных функционала (2) по переменным f_n ($n = 1, 2, \ldots$) получаем

$$\tilde{f}_{\alpha,n} = \frac{c_n}{1 + \alpha\xi}.$$

Отсюда находим

$$\tilde{f}_\alpha(b) = \sum_{n=1}^{\infty} r(n, \alpha)\, c_n \varphi_n(b),$$

где

$$r_{n,\alpha} = \frac{1}{1 + \alpha\xi_n}.$$

Функция $\tilde{f}_\alpha(b)$ вычисляется по правилу

$$\tilde{f}_\alpha(b) = \lim_{k\to\infty} \sum_{n=1}^{k} r(n, \alpha)\, c_n \varphi_n(b).$$

В нашем случае величина δ, как правило, неизвестна. Поэтому определить α по невязке мы не можем. Для α мы берем его квазиоптимальное значение [3]:

$$\alpha = \inf_{\alpha'} \sup_{\rho_U(u_\delta, u_T) \leqslant \delta} \left\| \alpha' \frac{d\tilde{f}_{\alpha'}}{d\alpha'} \right\|_F.$$

Если в правой части — одна конкретная функция u_δ, то

$$\alpha = \inf_{\alpha'} \left\| \alpha' \frac{d\tilde{f}_{\alpha'}}{d\alpha'} \right\|_F.$$

Если таких значений несколько, то в качестве α берем наименьшее из них (ослабленная форма квазиоптимального α).

Таким образом, изложенный выше подход позволяет построить функцию $\widetilde{f}(b)$, аппроксимирующую $f(b)$ при произвольном b.

В статистической физике часто определяют решение в форме, которая лучше всего соответствует имеющимся экспериментальным данным (например, в виде аппроксиманты Паде), т. е. класс возможных решений сужается. В этом случае нам, естественно, удобнее использовать метод подбора: в качестве приближенного решения берем элемент $\widetilde{f} \in M$, где M — заранее заданный подкласс возможных решений, причем

$$\rho_U(A\widetilde{f}, u) = \inf_{f \in M} \rho_U(Af, u). \quad (3)$$

Расчеты, проведенные для конкретных статистических систем, показали эффективность данного подхода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Базаров И. П., Николаев П. Н. Журн. физ. химии, 1983, 57, с. 1609. [2] Арсенин В. Я. ДАН СССР, 1968, 183, № 2, с. 257. [3] Тихонов А. Н., Гласко В. Б. ЖВМ и МФ, 1965, 5, № 3, с. 463.

Поступила в редакцию
25.10.25

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 4

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 537.334.8

ЗАВИСИМОСТЬ ФРАКЦИИ ВЫЖИВАНИЯ ОТРАЖЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ОТ ВЗАИМНОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ АТОМНЫХ РЯДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА

Л. Л. Балашова

(НИИЯФ)

Эксперименты [1—3] по изучению отражения ионов азота N_2^+ от поверхности кристалла обнаружили сильную зависимость доли молекулярных ионов, рассеянных без диссоциации (фракции выживания), от ориентации мишени относительно плоскости падения первичного пучка. Такая зависимость для ионов азота энергии 30 кэВ при их взаимодействии с гранью (100) кристалла меди была установлена в работах [1, 2] и при взаимодействии с гранью (110) кристалла меди — в работе [3]. В данной работе мы проанализируем, как связаны различия в характере ориентационных зависимостей отражения с различиями в кристаллической структуре самих граней. Такое сопоставление позволит точнее сформулировать вопрос о механизме бездиссоциативного отражения молекулярных ионов поверхностью кристалла.

На рис. 1, *а* представлен вид сверху на грань (100), а на рис. 1, *б* — на грань (110) гранецентрированной кубической решетки; при этом черные кружки — это атомы поверхностного монослоя, а светлые — лежащего под ним следующего, второго монослоя. Сплошные линии на рис. 1 показывают главные кристаллографические направления на поверхности кристалла. Легко видеть, что одному и тому же кристаллографическому направлению на двух разных гранях кристалла может соответствовать как сходное, так и совершенно различное взаимное расположение упорядоченных атомных рядов.

Возьмем направление <100>. Вид сверху на поверхность (100) показывает, что между соседними рядами <100> атомов, лежащих на поверхности, имеются бесконечно глубокие провалы. В том же направлении <100> структура грани (110) совсем иная: здесь два соседних ряда <100> атомов, лежащих на поверхности, вместе с рядом <100>, лежащим в углублении между ними, образуют поверхностный «полуканал». Из экспериментов по рассеянию атомарных ионов известно о сильном фокусирующем действии поверхностных полуканалов [4]; аналогичного эффекта можно было ожидать и при отражении молекулярных ионов. Так оно дей-