

表 3 不同温度下纯 LiI 和 LiI + 40m/0 γ -Al₂O₃ 样品中自旋-晶格弛豫时间

温度 (K)	T_1	
	LiI (sec)	LiI + 40m/0 γ -Al ₂ O ₃ (ms)
273		89.90
291		6.55
298		46.40
300	46.40	
321		10.88
331	8.70	
341		2.61
361	4.35	1.09
371	7.98	1.16

η -Al₂O₃ 的样品为最明显(见图 1)。此小峰也随温度的变化而变化(见图 5)。在纯 LiCl 中 ⁷Li 的核磁共振吸收谱线上没有观测到叠加的小峰。

此外,对 LiCl (SiO₂) 样品中 ⁷Li 的核磁共振也进行了观测,得到了类似的结果(见图 6)。

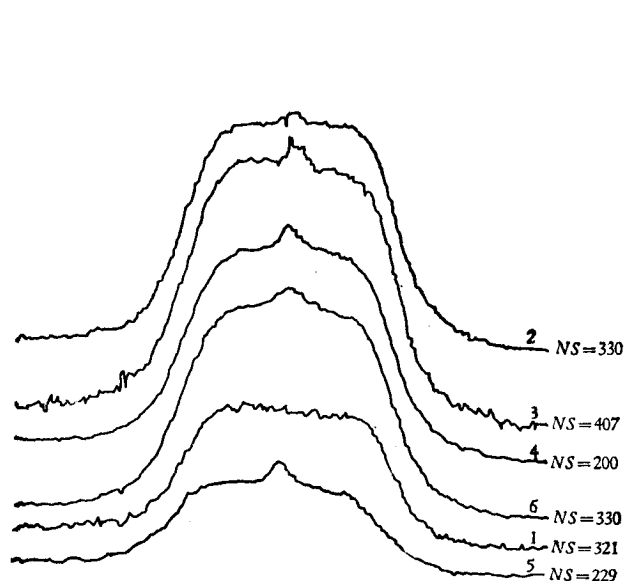


图 4 纯 LiCl(1), LiCl + 10m/0 γ -Al₂O₃ (2), LiCl + 15m/0 γ -Al₂O₃ (3), LiCl + 25m/0 γ -Al₂O₃ (4), LiCl + 30m/0 γ -Al₂O₃ (5)和 LiCl + 40m/0 γ -Al₂O₃ (6) 中 ⁷Li 的核磁共振吸收谱线(温度为296.7K; NS 为累加次数)

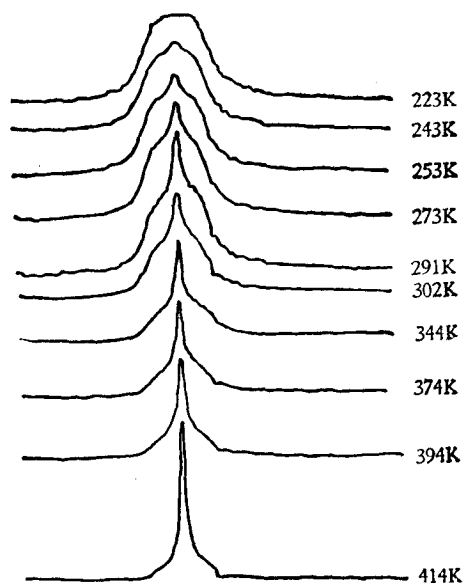


图 5 LiCl + 25m/0 η -Al₂O₃ 中 ⁷Li 的核磁共振吸收谱线随温度的变化

(2) 在含第二相粒子 (Al₂O₃, SiO₂) 的 LiCl 样品中, ⁷Li 的核磁共振信号的信噪比显著提高,且随 Al₂O₃ 的类型、含量和温度而变化。以含 25m/0 η -Al₂O₃ 的为最明显。

(3) LiCl (或 LiI) 加入第二相粒子后,其自旋-晶格弛豫时间变短,且也随 Al₂O₃ 的类型、含量和温度而变化。

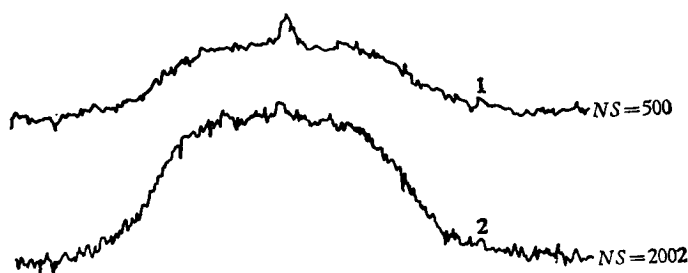


图6 $\text{LiCl} + 25\text{m}/0 \text{ SiO}_2$ (1) 和 $\text{LiCl} + 10\text{m}/0 \text{ SiO}_2$ (2) 中 ^7Li 的核磁共振吸收谱线(温度为 300K)

四、讨 论

目前,已对几种含第二相粒子的离子导体的离子电导率进行了测量,结果都表明离子电导率大大地提高了. 我们的核磁共振实验又观察到前述的一些实验现象. 那么,如何解释离子电导率的提高和上述的核磁共振现象呢? 它们之间有什么内在联系呢?

X 射线物相分析表明,所有的第二相粒子在 LiCl 中都无可察觉的固溶度,也没有形成新相. 因此, $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 是两相混合物. 简单的分析可知,经典的掺杂理论不能用来解释 $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中离子电导率的提高.

所以, $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中离子电导率提高的原因,必须从 LiCl 基体,绝缘和不溶解的 Al_2O_3 粒子以及它们所形成的混合物(尤其是两相分界面)等方面来考虑.

把核磁共振的实验结果与电导率的测量^[8]进行比较, 可知离子电导率和小峰之间存在一定的对应关系,即小峰的大小和离子电导率提高的大小之间是线性关系. 因此,可以认为分散的第二相粒子既使 LiCl 中离子电导率提高,又使 ^7Li 核磁共振吸收谱线上出现叠加的小峰. 这个小峰反映了加入第二相粒子后,运动离子扩散增强的程度. 如果我们把运动加快的那部分离子对体系中 Li^+ 离子电导率 σ 的额外贡献记作 $\Delta\sigma$,其余 Li^+ 离子对 σ 的贡献记为 σ_0 ,那么就有

$$\sigma = \sigma_0 + \Delta\sigma.$$

这样,小峰大,说明运动加快的那部分(变为比较自由运动的)离子数多,即 $\Delta\sigma$ 大,从而 σ 大. 反之亦然. 因此,了解离子电导率提高的机理,就变为解释小峰为什么会出现了.

可以认为, $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中 ^7Li 的核磁共振谱线由两部分(窄谱线和宽谱线)构成. 这是由于处在不同环境并具有不同速度(或迁移率)的两类核(分别用 $^7\text{Li}^a$ 和 $^7\text{Li}^b$ 来表示)所造成的.

在热平衡下的纯离子晶体,具有带电的表面和接近表面的具有相反符号的空间电荷层^[10]. LiCl 是肖脱基型无序的离子晶体. 如果把 LiCl 和 Al_2O_3 之间形成的紧密分界面看作是 LiCl 的表面,为了达到电中性,在靠近此表面的 LiCl 中就产生了过量的 Li^+ 离子空位,从而提供了 Li^+ 离子易于徙动的路程. 这样,就出现了两种类型的 Li^+ 离子,表面附近的用 Li^a 表示,体内的用 Li^b 表示. 显然, $^7\text{Li}^a$ 的迁移率就要比 $^7\text{Li}^b$ 的迁移率大得多. 因此, $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中 ^7Li 的核磁共振谱线就不是由一条谱线,而是由两条谱线所构

成。在低温 ($<233\text{K}$) 下, ${}^7\text{Li}^{\text{a}}$ 和 ${}^7\text{Li}^{\text{b}}$ 都不运动, 所以 ${}^7\text{Li}$ 的核磁共振谱线表现为一宽谱线(刚性点阵谱线)。随着温度的升高, 两类核(或离子)都开始运动, 但具有不同的速度(或迁移率), 因而它们的运动变窄效应也就不同, 结果导致了小峰的出现。最后, 当温度高于 414K 时, 两类离子具有相同的迁移率, 所以窄谱线和宽谱线相重合, 即窄谱线占了优势。

核磁共振谱线所包围的面积和参与共振的原子核(或离子)的数目成正比。对于同一样品, 其谱线面积是固定的。所以不同类型的 Al_2O_3 (α -、 γ -和 η - Al_2O_3) 和含量对小峰有着明显的影响, 其原因可能与不同类型 Al_2O_3 的颗粒大小和两相混合物分界面的结构有关。

此外, 由于 $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中的空间电荷层比纯 LiCl 中的空间电荷层要大得多。这样, 分散的第二相粒子(弥散体)的存在就增强了晶格场, 从而使 ${}^7\text{Li}$ 核自旋与晶格场之间有一种强的相互作用, 结果是 ${}^7\text{Li}$ 核与晶格场之间交换能量过程的速度加快了。由于 ${}^7\text{Li}$ 核与晶格场之间的相互作用是通过偶极-偶极相互作用进行的。所以, ${}^7\text{Li}$ 核与晶格场之间的相互作用强了, 则偶极-偶极相互作用就弱了。这说明迅速运动着的传导离子 (Li^+) 产生了类似液体中的那种平均效应, 从而 Li^+ 离子更易运动, 致使谱线变窄, T_1 变短。这也反映在信噪比的提高上。

综上所述, LiCl 加入第二相粒子后, 其离子电导率提高的原因, 不是由于其结构的改变, 而是由于空间电荷层的加大从而使 Li^+ 离子空位浓度加大, 增强了 ${}^7\text{Li}$ 核自旋与晶格场之间的相互作用, 使部分 Li^+ 离子扩散增强, 运动加快, 结果导致了高的离子电导率。是否也与体性质有关? 有待作进一步的研究。所以, $\text{LiCl}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 中离子电导率的提高和 ${}^7\text{Li}$ 核磁共振吸收谱线上叠加的小峰, 都是由于存在分散的第二相粒子所造成的。

本工作得到郭全中、曹琪娟、钟晓春、薛荣坚、王连忠等同志的支持和帮助, 天津电源研究所提供了 $\text{Li}(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 和 η - Al_2O_3 样品, 在此表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] Physics of Superionic Conductors, ed. M. B. Salamon, Springer-Verlag, New York, (1979).
- [2] C. C. Liang, *J. Electrochem. Soc.*, **120**(1973), 1289.
- [3] C. C. Liang, A. V. Joshi, N. E. Hamilton, *J. Appl. Electrochem.*, **8**(1978), 445.
- [4] T. Jow and J. B. Wagner, Jr., *J. Electrochem. Soc.*, **126**(1979), 1963.
- [5] S. P. Pack, Abstract No. 133 in "The Electrochemical Society 156th meeting, Oct. 1979".
- [6] K. Shahi and J. B. Wagner, Jr., Abstract No. 134 同上.
- [7] P. M. Dubee and J. B. Wagner, Jr., Abstract No. 135 同上.
- [8] 陈立泉、赵宗源、王刚、李子荣, 科学通报, **2**(1981), 79.
- [9] 王刚、李子荣, 物理, **8**(1981), 461.
- [10] K. L. Kliewer and J. S. Koehler, *Phys. Rev.*, **140**(4A) (1965), A1226.

^7Li NMR INVESTIGATIONS IN LiCl WITH DSPP

WANG GANG LI ZI-RONG CHEN LI-QUAN ZHAO ZONG-YUAN

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

In order to understand the mechanism of the ionic conductivity enhancement in LiCl (or LiI) containing dispersed second-phase particles (DSPP), we have performed ^7Li NMR investigations on both line width and spin-lattice relaxation time (T_1) at 35 MHz in temperature range of 173—483 K. An additional peak was observed to overlap the resonance absorption line. The signal-to-noise ratio was obviously increased while T_1 decreased. The profile of this peak changes with type and content of DSPP and temperature. It is concluded that the ionic conductivity enhancement and the appearing of the additional peak are both given rise by the DSPP of submicron size. The high conduction in the space charge region near the interface between LiCl and DSPP is suggested as a possible mechanism for the ionic conductivity enhancement and the appearing of the additional peak.

离子导体在直流偏压作用下的介电特性

许政一 朱 镛 张道范 李晨曦

(中国科学院物理研究所)

1981年3月18日收到

提 要

在我们以前的工作中,发现 α -LiIO₃ 在 c 向直流偏压作用下表观介电常数增加,并把这一现象归结为由离子导电所产生^[1-3]. 本文进一步研究了离子导体 KLiSO₄ 和 NaCl 单晶在直流偏压下的介电特性,也观察到了表观介电常数改变的现象,证实了上述结论的正确性. 我们也研究了离子导体的这一特性与温度、频率和样品四周气氛的关系,讨论了它发生的条件.

在文献[1,2]中,观察到加直流偏压后, α -LiIO₃ 单晶的表观介电常数增加,且这种增加具有复杂的弛豫过程. 并且把这个现象归结为由 α -LiIO₃ 的离子导电形成的空间电荷分布所引起. 在文献[4]中,对 Ag 离子导体卤化银也观察到了这一现象. 但这一结论是否具有普遍性,尚有待于作更多的实验来证实.

我们对 KLiSO₄ 单晶在直流偏压下的介电特性作了研究,也观察到了其表观介电常数增加. 并对 α -LiIO₃, KLiSO₄ 和 NaCl 等离子导体研究了这一现象的弛豫行为,及其对温度和频率的依赖关系,进一步证实了它由离子电导引起这一结论的正确性.

一、在直流偏压下 KLiSO₄ 和 NaCl 单晶表观介电常数增加

KLiSO₄ 空间群为 P6₃, 是非铁电性电极性晶体(热电晶体)^[5]. 它为 Li 离子导体, a 向电导和 c 向电导同数量级^[6], 因此我们对 a 切样品和 c 切样品都作了研究. KLiSO₄ 单晶样品由本所晶体学室溶液晶体生长组提供. 样品定向切割, 细磨后涂上金浆, 烧成金电极备用. NaCl 单晶样品由中国科学技术大学提供, 电极为烧银电极. 介电常数用 GR 1621 精密电容测量系统测量. 测量时所加讯号电压为 0.5V. 本文中所引的有关 KLiSO₄ 的数据主要取自两块样品: c 切样品 c 向厚 1.48mm, 电极面积为 23.5cm²; a 切样品 a 向厚 1.15mm, 电极面积为 30mm².

在 474°C 对 a 切样品加 6V 直流电压, 样品 1kHz 表观介电常数 ϵ'_a 增加, 撤去电压, 表观介电常数恢复原来数值. 表观介电常数增加和恢复都有一个很长的弛豫过程, 如图 1 所示. 有时加直流电压后, 表观介电常数略有下降, 然后上升, 并大大超过最初的数值. 撤去直流电压后, KLiSO₄ 表观介电常数随时间的变化规律与 α -LiIO₃ 完全相同^[2], 可以用表达式

$$\begin{aligned}\varepsilon'_a(t) - \varepsilon'_a &= \Delta\varepsilon'_a(t/t_0)^{-\beta} & 1\text{min} \leq t < t'_k \\ \varepsilon'_a(t) - \varepsilon'_a &= \Delta\varepsilon'_a(t/t_0)^{-\beta' \ln(t/t_0)} & t > t'_k\end{aligned}\quad (1)$$

来描写. $t_0 = 1\text{min}$, $t'_k = 15\text{min}$, ε'_a 为未加直流偏压时的 α 向表观介电常数, t 以撤去电压的时刻为零点. 弛豫参数 $\beta = 0.68$, $\beta' = 0.38$. (1) 式实际上是电流弛豫的反映, 和文献 [6] 中测得的电流弛豫规律是一致的.

对 c 切样品, 在温度高于 437°C 时得到了完全类似的结果: 加直流偏压后表观介电常数增加, 其弛豫规律也和 α 向表观介电常数的一样.

KLiSO_4 和 $\alpha\text{-LiIO}_3$ 有一个重大的差别. $\alpha\text{-LiIO}_3$ 加同号电压和异号电压对表观介电常数增加倍数不同, 但各有明确的值. KLiSO_4 的绝对构型尚未定出, 因此对 c 切样品无法确定何种情况属同号电压, 何种情况属异号电压. 假如我们任意对 c 切样品加上直流偏压, 我们记为 $(+V)$, 表观介电常数增加. 使外加电场反向, 我们记为 $(-V)$, 则表观介电常数非但不增加, 反而减小, 而且撤去偏压后的表观介电常数也比原来小. 再次加 $(-V)$ 测量, 表观介电常数又略有增加. 多次重复加 $(-V)$ 实验, 增加倍数逐次增大. 再加电压 $(+V)$, 则表观介电常数又减小. 而且对 a 切样品也有同样结果. 所以对 KLiSO_4 来说, 外加直流偏压反向, 其结果的差异不是由晶体极性引起. 看来是由于我们使用非可逆电极, 加直流偏压造成晶体电解的缘故.

对 NaCl 单晶样品(厚 1.05mm , 电极面积 0.85cm^2) 在 382°C 加直流偏压 6V , 同样观察到了表观介电常数增加. 和 KLiSO_4 类似, 这一现象也有很长的弛豫过程. 不同之处为撤去直流电压后介电常数很快减小两倍, 然后按 (1) 式的方式衰减. 其弛豫参数为 $t_0 = 1\text{min}$, $t'_k = 30\text{min}$, $\beta = 0.044$, $\beta' = 0.05$.

二、直流偏压下离子导体表观介电常数增加与温度和频率的关系

只有当温度高于某临界温度时, 加直流偏压后离子导体的表观介电常数才增加. 此临界温度对不同离子导体差别很大. 一般说来, 离子电导较大的材料, 临界温度较低. 图 1 是在不同温度下 KLiSO_4 单晶 1kHz 的表观介电常数因加上和撤去直流偏压而变化的情况.

我们把一定温度下离子导体表观介电常数不再因加直流偏压而增大的最低频率叫做截止频率 f_c , 它是温度的函数. 图 2 是 $\alpha\text{-LiIO}_3$ 1 号样品(厚 1.32mm , 电极面积 2.54cm^2) 的截止频率随温度变化的情况, 图中数据在真空容器中测得. 由于接近截止频率时, 表观介电常数增加倍数缓慢(见图 3), 因此截止频率很难定准. 图 2 中的 f_c 是以表观介电常数增加倍数小于 5% 即作为没有增加而定出的. 温度低于 5°C 时, $\ln f_c \propto \frac{1}{T}$, 在温度高

于 5°C 时, 截止频率对温度不敏感. 即升高温度, $\alpha\text{-LiIO}_3$ 中离子能够响应的频率也不会显著增加了. KLiSO_4 在 c 向加直流偏压时, 截止频率对温度的曲线非常陡, 或者说对于我们测量范围的各个频率, 相应的临界温度很接近, 要准确测出类似图 2 的曲线很困难. 对 a 向加直流偏压, 情况类似.

图 3 所示为离子导体加直流偏压后表观介电常数增大倍数与频率的关系. 图中 α -

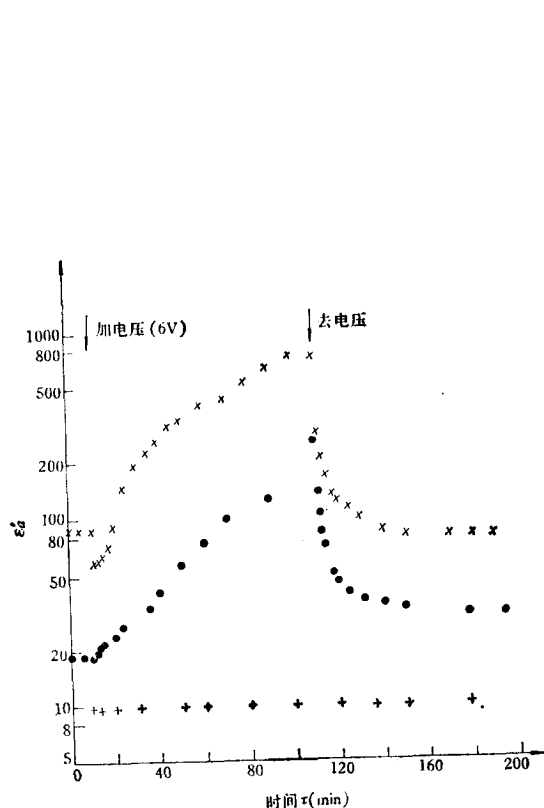


图1 不同温度下加上和撤去直流偏压 6V 后
KLiSO₄ 的 1kHz 表观介电常数 ϵ'_a 的变化情况
× 为 475°C; ● 为 442°C; + 为 435°C

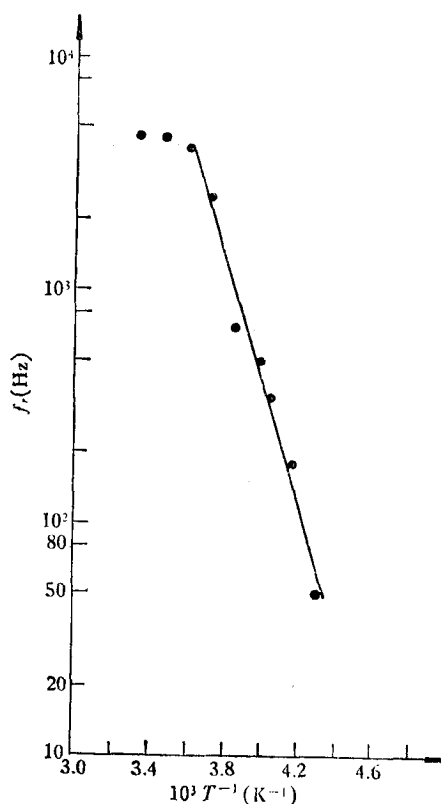


图2 α -LiIO₃ 的截止频率与温度的关系

LiIO₃ 的低温曲线在真空中测得, 而其 27°C 的曲线以及 KLiSO₄ 和 NaCl 的曲线在空气中测得. 频率愈低, 离子导体的表观介电常数数值也愈大. 加直流偏压后, 表观介电常数增加的值也随频率减小而单调上升. 但表观介电常数的增大倍数不一定随频率单调变化. 对 KLiSO₄, 在某一频率, 增大倍数极大. 当温度升高时, 此频率向高频方向移动.

当低于截止频率时, 在所加偏压及温度等条件不变的情况下, 撤去直流偏压后表观介电常数减小的弛豫规律和测介电常数的频率无关. 对 α -LiIO₃ 的 1 号样品, 当频率由 10 Hz 增至 500Hz 时, 测得弛豫参数 β 在 0.20 至 0.22 的范围内变化, β' 在 0.09 至 0.11 的范围内变化. 由于测量是在空气中进行的, 考虑到室温和湿度的变化, 可以认为 β 和 β' 不随频率变化. 因为不论什么频率的表观介电常数的弛豫实际上都是电流弛豫过程的反映, 所以 β 和 β' 不随频率改变是合理的.

三、气氛的影响

α -LiIO₃ 的电导受环境影响, 在真空中和空气中有很大差别^[7]. 我们发现其介电行为在真空和空气中也不相同, 主要受周围空气湿度的影响. 空气中表观介电常数的实部较真

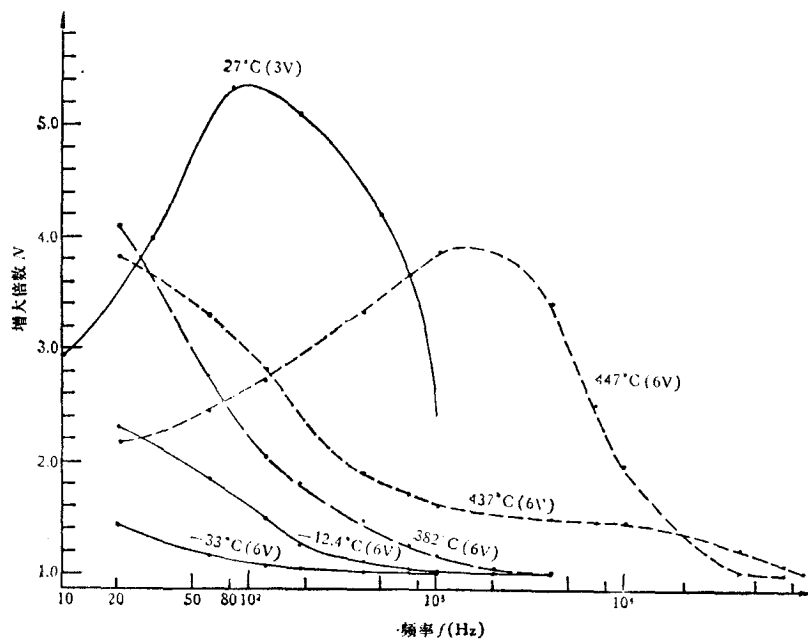


图3 离子导体加直流偏压后表观介电常数增大倍数和频率的关系
括号内为所加直流偏压值; — 为 $\alpha\text{-LiIO}_3$, c 向;
- - - 为 LiKSO_4 , c 向; - · - 为 NaCl

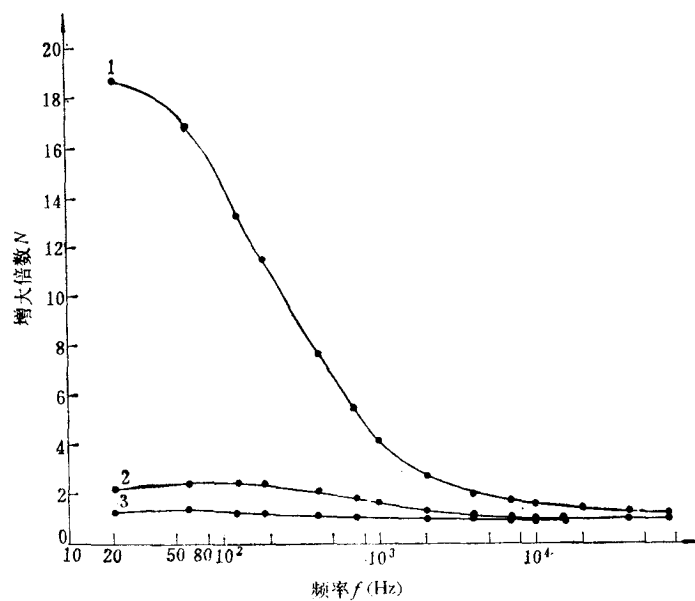


图4 直流电压作用下 $\alpha\text{-LiIO}_3$, c 向表观介电常数增加倍数受环境湿度的影响
1 为 24.5°C, 相对湿度 85%; 2 为 24.5°C, 相对湿度 58%; 3 为 25.5°C, 真空
(约 2×10^{-1} mmHg)

空中小,而且空气相对湿度愈大,介电常数值也愈小。低频区影响显著,高频区影响不大。但是加直流偏压后表观介电常数的增大倍数在空气中较真空中为大。例如在 25°C 时 $\alpha\text{-}$

LiIO_3 1号样品 20.2Hz 的表观介电常数在真空(约 2×10^{-1} mmHg)中为 10005, 在空气中(相对湿度为 85%)为 5618, 加同号 6V 直流偏压后分别为 12748 和 105219, 增加倍数则分别为 1.3 倍和 18.7 倍。

直流偏压作用下不同频率的表观介电常数增加倍数受周围空气湿度的影响情况示于图 4 中。图 4 表明, 相对湿度愈大, 增加倍数也愈大。并且具有显著的非线性特性。

对于 KLiSO_4 有着类似的现象, 由于加直流偏压后 KLiSO_4 表观介电常数增加发生在较高温度, 作定量的测量比较困难, 我们没有进行定量研究。

环境湿度对 $\alpha\text{-LiIO}_3$ 和 KLiSO_4 介电性质有影响, 可能主要是由于它们为水溶性晶体的缘故。要了解湿度对这些晶体的介电行为发生影响的具体机制, 尚需作进一步的研究。

四、讨 论

我们的实验证实了直流偏压下表观介电常数增加确实是离子导体的特性。它的发生必须满足两个条件: (1) 在直流电压作用下空间电荷(间隙离子或空位或两者)富集于边界层和宏观缺陷附近^[7], 也就是空间电荷的位置发生了改变; (2) 空间电荷对交变电场的响应较未加直流偏压时为大, 或者说重新分布后的空间电荷对测量信号的响应较它们在原来位置上时更大。第二个条件显然和晶体结构有关, 这在 KLiSO_4 单晶特别显著。 KLiSO_4 中的载流子为间隙 Li^+ 和 Li 空位, 在低于电导突变温度(437°C)时, 加直流偏压后虽然也有空间电荷的重新分布^[6], 但重新分布后的空间电荷对交变信号的影响并不更大, 所以观察不到表观介电常数的增加。在电导突变温度, KLiSO_4 的晶格参数也发生突变^[5], 使得空间电荷对交变信号的响应较它们在原来位置时增大, 表观介电常数显著增加。这也说明了为什么 KLiSO_4 在很小的温度范围内 f 就从数十赫兹很快增至十万赫兹。

我们对硅单晶也作了测量, 加直流偏压后表观介电常数没有变化。这是因为硅中的空间电荷为电子和空穴, 很易理解, 与离子和空位等空间电荷相比, 这类空间电荷对交变电场的响应受空间电荷所在位置的影响要小得多。

原则上并不排除离子导体在直流偏压场作用下表观介电常数减小(第一节表明, 在特殊条件下的 KLiSO_4 即如此), 即重新分布后的空间电荷对交变信号的响应较它们在原来的位置上更小。

NaCl 的载流子和卤化银, $\alpha\text{-LiIO}_3$, KLiSO_4 等都不同, 为肖脱基缺陷, 但在直流偏压下表观介电常数仍然增加。它表明在直流偏压下表观介电常数增加并具有长的弛豫过程似乎可作为判断离子导体的充分条件。但它不是离子导体的必要条件。 KLiSO_4 在临界温度以下电流弛豫也为按负幂次衰减的慢弛豫过程^[6], 表明这时它也是离子导电, 但在直流偏压作用下表观介电常数不增加。

离子导体在直流电压作用下的中子衍射和光散射增强现象都有低温冻结效应^[8,9]。直流偏压下表观介电常数增加的现象则不同, 不应存在类似的低温冻结现象。因为前两者只要求空间电荷分布在样品迅速冷却时能冻结即可; 而对后者, 迅速冷却时虽然空间电荷分布仍然冻结, 但空间电荷对交变信号响应也减小, 甚至离子迁移极化不再能跟上交变电

压的变化^[10]。当然就没有什么“低温冻结”现象了。实验也证实了此结论。

参 考 文 献

- [1] 朱镛、张道范、成希敏, 物理学报, **26**(1977), 115.
- [2] 朱镛、张道范, 物理学报, **29**(1980), 454.
- [3] 李铁城、许政一, 物理学报, **26**(1977), 500.
- [4] E. Fatuzzo, S. Coppo, *J. Appl. Phys.* **43** (1972), 1467.
- [5] R. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, **17**(1962), 937.
- [6] 朱镛、张道范、许政一, 物理学报, 待发表.
- [7] 张安东、赵世富、谢安云、许政一, 物理学报, **29**(1980), 1158.
- [8] 中国科学院原子能研究所 α -磷酸锂研究小组, 物理学报, **25**(1976), 129.
- [9] 赵世富、顾本源、张安东、许政一, 物理学报, **28**(1979), 305.
- [10] 朱镛、张道范、许政一, 科学通报, **26**(1981), 783.

DIELECTRIC PROPERTIES OF THE IONIC CONDUCTOR SINGLE CRYSTALS UNDER THE ACTION OF A DC FIELD

XU ZHENG-YI ZHU YONG ZHANG DAO-FAN LI CHEN-XI

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

In our previous works, it had been found the apparent dielectric constant ϵ' of α -LiIO₃ single crystal increases as a bias DC field is applied in the c direction. And it had been attributed to result of ionic conduction^[1-3]. In this paper, the dielectric properties of KLiSO₄ and NaCl single crystals under the action of a DC field have been investigated. Similar to the situation of α -LiIO₃ single crystal, the phenomenon of change of the apparent dielectric constant was observed in these crystals. It verified the conclusion mentioned above. We also studied the dependences of this property of ionic conductors on temperatures, frequencies and ambient atmosphere. The condition under which this phenomenon appears was discussed.

求解非中心对称晶体结构的 人工相位退化法

范海福 古元新 许章保

(中国科学院物理研究所)

1981年3月23日收到

提 要

在用直接法推引非中心对称晶体结构因子的相位时,如果人为地使相位退化为实分量的正负号,可以获得同时包含真实结构及其对映体的 E 图。利用分量关系式不难使这样的 E 图复原,从而解出结构。这样做,对于每一个参加相位排列的起始衍射只需考虑两种可能的相位值(0或 π),因而比通常的相位排列法节省计算量。

一、引 言

直接法应用中的一个困难问题是求解非中心对称晶体结构时经常遇到的相位退化问题。所谓相位退化,就是一组非中心对称的起始相位在扩展和修正的过程中收敛为一组中心对称类型的相位。这组相位的数值可以通过移动原点全部变为0或 π 。由一组退化相位计算的 E 图将同时包含真实结构以及其对映体的图像,从而造成解释上的困难。作者之一曾提出用分量关系式处理这一问题的方法^[1]。试验表明^[1,2]用分量关系式可以轻易地使混合两个对映体的 E 图复原。因此在我们看来,相位退化非但不是个有害的、需要回避的因素,反而是一个值得加以利用的因素。在不发生相位退化的情况下如果人为地强使相位退化,反而可以减少计算工作量。如果在测定非中心对称晶体结构时,强令起始套中的初始相位只取0或 π 的数值,其实际效果相当于将求解非中心对称结构的问题简化为求解中心对称结构的问题。虽然所得 E 图只是真实结构及其对映体的混合图像,但是利用分量关系式不难使之复原。而用于分量关系推算的工作量比从相位排列中节省下来的工作量要少得多。

二、原 理

根据分量关系式^[3,4],对于由近似等重的原子所组成的非中心对称晶体,结构因子的实分量同虚分量之间有如下关系:

$$\alpha_H = K \sum_{H'} \alpha_{H'} \alpha_{H-H'} - K \sum_{H'} \beta_{H'} \beta_{H-H'}. \quad (1)$$

$$\beta_H = 2K \sum_{H'} \alpha_{H'} \beta_{H-H'}, \quad (2)$$

其中 α_H 和 β_H 分别为归一化结构因子 E_H 的实分量和虚分量; K 是一个常数.

设想在被分析的晶体中,按对称元素组合的规则加入一个对称中心,并把原点取在对称中心上,由此而得的一个假想晶体结构,其晶胞将同时包含原有的内容及其对称体,其归一化结构因子的虚部 β_H 将统统变为零而实部统统比原来大一倍并且具有相同的正负号. 这时(1)式和(2)式就退化为

$$\alpha_H = K' \sum_{H'} \alpha_{H'} \alpha_{H-H'}. \quad (3)$$

由于 α_H 的正负号的对称性同 β_H 的正负号的对称性有所不同,如果把一个非中心对称晶体当作中心对称晶体求解,也就是用一组非中心对称晶体的 E_H 代替(3)式中的 α_H ,硬按(3)式的关系推引它们的正负号,那末首先建立起强关系的 E_H 将大多是那些实分量较大而虚分量接近于零的衍射点. 由(1)式又可知,用 β_H 接近于零的衍射扩展出来的相位,实际上将是结构因子实分量的正负号. 这就是说,如果将一个非中心对称晶体按相应的中心对称空间群用直接法求解,所得符号将基本上是结构因子实分量的正负号. 用这样一组正负号计算的 E 图就是 $S(\alpha_H)|E_H|$ 的傅里叶反变换:

$$\Phi^{-1}[S(\alpha_H)|E_H|] = \frac{1}{V} \sum_H S(\alpha_H)|E_H| e^{-2\pi i H \cdot r}, \quad (4)$$

式中的 V 是晶胞的体积.

根据文献[1]的讨论,这样的 E 图将同时包含真实结构和它的对映体以及一些重量较轻的,无规分布的鬼峰. 读取图中较大的峰的坐标,就可以近似地从(5)式和(6)式计算出归一化结构因子的实部和虚部的绝对值 $|\beta_H|$.

$$\alpha_H = \sum_{j=1}^N \frac{Z_j}{\left(\varepsilon \sum_{j=1}^N Z_j^2 \right)^{\frac{1}{2}}} \cos 2\pi H \cdot r_j, \quad (5)$$

$$|\beta_H| = \sqrt{|E_H|^2 - \alpha_H^2}. \quad (6)$$

最后,利用(2)式按文献[1]的方法可以求出 β_H 的符号. 用上述所得的 α_H 和 β_H 计算 E 图就可以消去多余的一个对映体,从而唯一地解出结构.

三、试 验

通常自然的相位退化多发生在属于极性空间群的晶体. 为了试验人工相位退化法的效果,我们选了一个属于非极性空间群的晶体.

苦玄参乙酰分子式为 $C_{31}H_{48}O_7$, 属于 $P2_12_12_1$ 空间群. 晶胞参数 $a = 22.36 \text{ \AA}$, $b = 15.28 \text{ \AA}$, $c = 9.09 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 每个晶胞中含有 4 个分子. 晶胞中独立的非氢原子有 41 个. 首先挑选了 6 个起始衍射(表 1). 其中有 5 个的结构因子的虚分量根据空间群 $P2_12_12_1$ 的对称性应等于零(取惯例原点). 剩下的一个, 511 衍射, 因为它可以同其余 5 个起始衍射组成许多强的实分量关系,而且这些关系之间的自洽性很好,故可以

表 1 起始衍射

h	k	l	$ E $	给定符号或记号	备 注
0	2	7	1.596	+	固定原点
14	9	0	1.48	+	
5	1	1	2.734	+	
8	2	0	1.77	a	
2	0	4	1.80	b	
4	2	0	1.355	c	

推断 511 衍射起码具有较大的实分量。这样一个起始套可以保证按 (3) 式推引正负号的过程能够顺利进行。令 027, 1490, 511 三个衍射的符号为“+”，以确定原点，其余三个衍射点的正负号分别以记号 a, b, c 代表。按空间群 $Pbca$ 的对称性及 (3) 式的符号关系，用附加记号法^[5]求得 $a = “-”$ ； $b = c = “+”$ ，并扩展出 249 个衍射点的正负号。用这 249 个归一化结构因子计算了 E 图。在此 E 图上最大的 30 个峰当中有 25 个峰相应于真实的原子或其对映体，有 5 个峰是鬼峰。用这最大的 30 个峰的坐标按 (5) 式近似地计算出归一化结构因子的实分量 α_H ，又按 (6) 式近似地求出归一化结构因子虚分量的绝对值 $|\beta_H|$ 。利用 (2) 式按文献 [1] 的方法求出 β_H 的正负号。

用如此所得的 α_H 和 β_H 计算新的 E 图。在这张 E 图中多余的一个对映体已被消除，图中明确无误地显现出 34 个独立的原子，约占独立原子总数 (41) 的百分之八十 (参看图 1)。经一轮电子密度逼近就获得整个结构。这个试验可以说是相当成功的。

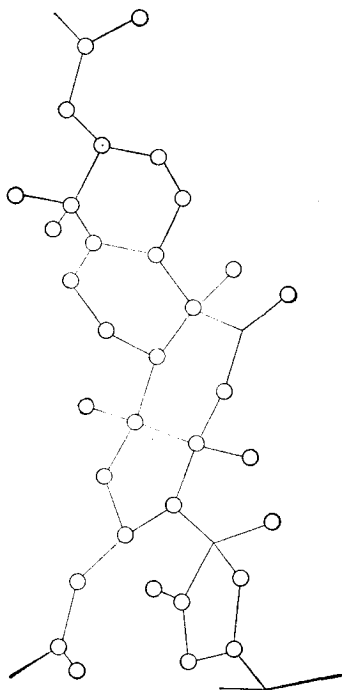


图 1

四、讨 论

1. 要使人工相位退化法能够顺利执行，关键在于必须选择虚分量较小的衍射作为起始衍射。在对衍射相位一无所知的情况下，空间群的对称性可以为选择起始衍射提供线索。对于包含偶次的轴对称元素的非中心对称晶体，总可以找到一组或多组衍射，其结构因子的虚分量被空间群的对称性限定为零。例如 $P2_1$ 空间群 ($2_1 \parallel b$) 中的 $h0l$ 衍射， $P2_12_12_1$ 空间群 (取惯例原点) 中的 $hk0$ ($h = 2n$)， $h0l$ ($l = 2n$)， $0kl$ ($k = 2n$) 三组衍射，等等。这些衍射点中 E 值较大，关系式较多者就可以选作起始衍射。如果有需要在起始套中加入其他类型的衍射点，

可根据其是否能同已有衍射建立强的、自治性好的关系式来挑选。上述选择起始套的办法可以适用于多数非中心对称的空间群。

2. 人工相位退化法的特点在于把非中心对称的相位问题转化为 中心对称的相位问题。如果把结构因子分作实、虚两部来考虑，可以认为，所谓非中心对称的相位问题就是

要同时解决衍射点实部正负号和虚部正负号的问题。其复杂程度大致正比于 4^N , N 是起始套中相位待定的衍射点数目。所谓中心对称的相位问题则是只需要解决衍射点实部的正负号的问题。其复杂程度大致正比于 2^N 。这样, 人工相位退化法原则上可以将问题简化为原来的 $1/2^N$ 。尽管它需要添加分量关系的推导并多计算一次 E 图, 但仍然可以节省大量的计算工作。如果将这样节省下来的计算量用于增加起始套中待定相位衍射点的数目, 这对于处理复杂的结构测定问题将大有帮助。

3. 在直接法当中用于扩展相位的办法主要有附加记号法和相位排列法两种。前者素有运算简捷快速的特点, 尤以解决中心对称相位问题时更为突出。但是在解决非中心对称的相位问题时, 则似不如相位排列法那样稳妥。人工相位退化法既然可以把非中心对称的相位问题转化为中心对称的相位问题, 它就为附加记号法应用于非中心对称晶体结构的测定创造了更好的条件。另一方面, 附加记号法扩展相位的方式比之相位排列法也更适合于人工相位退化法的需要。因此, 将人工相位退化法同附加记号法结合起来, 将进一步提高效率。

参 考 文 献

- [1] 范海福, 千金子, 物理学报, **30** (1981), 594.
- [2] 范海福, 郑朝德, 郑启泰, 物理学报, **30** (1981), 602.
- [3] 范海福, 物理学报, **21** (1965), 1114.
- [4] J. Karle, *Acta Cryst.*, **21** (1966), 273.
- [5] I. L. Karle and J. Karle, *Acta Cryst.*, **16** (1963), 969.

ARTIFICIAL PHASE DEGENERATION IN THE DETERMINATION OF NON-CENTROSYMMETRIC STRUCTURES

FAN HAI-FU GU YUAN-XIN XU ZHANG-BAO
(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

During the phase derivation in the case of non-centrosymmetric crystal structure, if one forces the phases to degenerate into a set of signs corresponding to those of the real parts of structure factors, it then results in an E -map containing simultaneously the actual structure and its enantiomorph. Such an E -map may in turn easily be retrieved by use of the component relation leading to a unique solution of the structure. With this procedure only two possible values (0 or π) are necessary to be considered for each unknown phase within the starting set. Hence the amount of calculation can be greatly reduced as compared with that of the ordinary phase permutation method.

二甲亚砷硝酸铕的晶体结构

林永华 胡宁海 刘书珍 周清廉 武士学 王明义 史恩栋

(中国科学院长春应用化学研究所)

1981年3月30日收到

提 要

二甲亚砷硝酸铕 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{DMSO}$ 晶体属单斜晶系。空间群为 $C_{2/c}-C_{2h}^2$ 。晶胞参数 $a = 14.806(9)\text{\AA}$, $b = 10.948(3)\text{\AA}$, $c = 15.335(4)\text{\AA}$, $\beta = 108.07(7)^\circ$ 。晶胞内分子数 $z = 4$ 。用 PW-1100 四圆衍射仪收集强度数据, 独立衍射点数为 2270 个。用重原子法解晶体结构。结构参数用全矩阵及方块矩阵最小二乘法修正, 最后 R 因子为 0.069。铕离子由 10 个氧原子配位。铕和配位氧之间的距离: $\text{Eu}-\text{O}_{\text{DMSO}} = 2.38\text{\AA}$, $\text{Eu}-\text{O}_{\text{NO}_3} = 2.61\text{\AA}$ 。

前 言

二甲亚砷硝酸铕 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 [(\text{CH}_3)_2\text{SO}]_4$ (简称 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{DMSO}$) 是一种有萃取、催化和发光性能的稀土亚砷类化合物。早在六十年代末, Ramalingam^[1] 就首次制备出一系列的这类化合物 $\text{Ln}(\text{NO}_3)_3 \cdot n\text{DMSO}$, 接着曾有人对其中的一些晶体结构作了研究^[2,3]。近年来, 利用 Eu^{3+} 离子作为荧光探针, 研究无机、有机高分子和生物大分子等结构正引起人们越来越多的兴趣和重视。因此, 为了弄清 Eu^{3+} 的发光性质与其近邻环境的配位和对称关系, 我们选择了含有 Eu^{3+} 离子的 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 [(\text{CH}_3)_2\text{SO}]_4$ 晶体, 用 X 射线单晶衍射的方法, 测定了二甲亚砷硝酸铕的晶体结构。

实 验

二甲亚砷硝酸铕的制备方法: 将一克分子硝酸铕和四克分子二甲亚砷加入甲醇溶液中, 然后放在干燥器中自然蒸发, 即可析出浅红色的晶体。用乙二胺四乙酸络合滴定法和选择性电极法分析结果如下: $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 [(\text{CH}_3)_2\text{SO}]_4$ 计算值: Eu_2O_3 , 27.07; N, 6.46。实测值: Eu_2O_3 , 27.36; N, 6.46。

晶体的吸收光谱、激发光谱和荧光光谱测定表明, 主激发峰为 395nm, 主发射峰为 619nm^[4]。

用迴摆法及 Weissenberg 照相法获得 Laue 对称型为 $2/m$, hkl 衍射, $h+k=2n+1$ 消光; $h0l$ 衍射, $l=2n+1$ 消光; $0k0$ 衍射, $k=2n+1$ 消光。晶胞参数 $a = 14.806(9)\text{\AA}$, $b = 10.948(3)\text{\AA}$, $c = 15.335(4)\text{\AA}$, $\beta = 108.07(7)^\circ$ 。当晶胞内分子数

$Z = 4$ 时, 晶体密度的计算值 $D_x = 1.520 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 由此确定晶体的空间群为 $C_{2/c}$. $F(000) = 1296$.

用 PW-1100 四圆衍射仪收集衍射强度数据. MoK_α 辐射, 扫描速度 0.035° , θ 范围 $2.5^\circ - 25^\circ$, 共收集到 2270 个独立的衍射点, 其中不可观测点为 224 个. H, K, L 最大值分别为 17, 12, 18, 对收集的强度数据进行了 PL 因子校正.

结构测定和修正

应用重原子法测定 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{DMSO}$ 晶体结构. 由实验数据计算三维 Patterson 函数, 从 $P(0v1/2)$ Harker 切面分析, 得出一套 Eu 原子的坐标参数: 0, 0.1125, 0.250.

用 Eu 的坐标参数计算电子云密度分布函数 $\rho(xyz)$, 从而肯定了重原子的位置, 并且还推引出两个 S 和三个 O, $R = 0.32$. 接着进行下一轮计算就导出了全部 S, O, N 和 C 原子的坐标参数. 这样, 经过五轮 Fourier 逼近, R 值降到 0.20.

最后, 对原子坐标参数、标度因子及温度因子作了修正. 对于各向同性和各向异性温度因子分别采用了全矩阵和块矩阵最小二乘方法, 得出 $R = 0.069$, 加权后 $R_w = 0.074$, 此处 $R_w = [\sum W(F_o - F_c)^2 / \sum F_o^2]^{1/2}$, $W = 1/\sigma_F^2$. 原子坐标参数、各向异性温度因子及标准偏差均列于表 1.

表 1 原子坐标参数, 各向异性温度因子及偏差数据($\times 10^4$)

原子	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{23}	β_{13}
Eu	50000(0)	61756(4)	25000(0)	216(2)	375(3)	199(2)	0(0)	0(0)	207(3)
S ₁	53284(4)	67425(19)	2818(12)	314(9)	698(24)	226(11)	30(24)	-3(37)	216(15)
S ₂	56311(21)	86638(22)	27098(18)	618(14)	681(28)	367(15)	26(33)	-10(47)	360(25)
O ₁	56434(43)	66359(64)	13217(39)	371(28)	748(76)	193(32)	162(77)	194(112)	285(50)
O ₂	59745(49)	79368(58)	30840(48)	452(32)	414(60)	360(42)	-250(76)	282(122)	326(61)
O ₃	77540(54)	51456(94)	42915(63)	352(33)	1295(131)	514(62)	-86(110)	44(212)	-50(77)
O ₄	56852(46)	53875(69)	29635(46)	341(30)	973(96)	335(42)	22(89)	-65(148)	93(59)
O ₅	63289(58)	57566(80)	41798(57)	525(40)	986(107)	492(54)	125(107)	-41(168)	464(77)
O ₆	50627(53)	40617(58)	18206(47)	504(35)	600(64)	345(40)	35(81)	-23(117)	316(62)
O ₇	50000(0)	23257(100)	25000(0)	1265(130)	390(78)	867(97)	0(0)	0(0)	546(180)
N ₁	69490(46)	54244(63)	38389(51)	229(27)	505(76)	346(46)	-20(78)	59(139)	135(60)
N ₂	50000(0)	34394(113)	25000(0)	403(53)	671(86)	392(52)	0(0)	0(0)	135(85)
C ₁	52179(97)	81841(132)	49800(109)	583(68)	1170(188)	784(119)	-201(194)	-239(334)	610(150)
C ₂	63956(69)	70733(108)	408(66)	420(45)	1056(137)	365(58)	-135(133)	-13(199)	571(87)
C ₃	77664(124)	82715(194)	34012(198)	583(79)	1469(266)	1361(248)	282(244)	176(551)	856(231)
C ₄	66227(127)	98577(133)	18041(178)	753(86)	718(152)	1261(224)	277(189)	197(420)	655(234)

在计算中所用的原子散射因子,采用国际结晶学表第四卷上的参数^[2]. 本文全部数据均用自编重原子法计算程序,在 TQ-16 型计算机上进行计算的.

结 构 讨 论

二甲亚砷硝酸铕晶胞中含有四个 $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{DSMO}$, 不对称单位含有一个分子. 由诸原子坐标参数导出的键长及键角数据均列于表 2 和表 3. 图 1 示出晶体结构在(001)平面上的投影.

表 2 键长数据

原子 I	原子 II	键长 (SD)(Å)	原子 I	原子 II	键长 (SD)(Å)
Eu	O ₁	23.44(7)	O ₂	O ₂	2.889(9)
Eu	O ₂	2.410(6)	O ₁	O ₂	2.958(9)
Eu	O ₃	2.552(7)	O ₁	O ₃	3.155(11)
Eu	O ₄	2.527(7)	O ₂	O ₄	3.010(10)
Eu	O ₅	2.753(7)	O ₂	O ₅	2.873(11)
S ₁	O ₁	1.521(6)	O ₁	O ₄	2.860(9)
S ₂	O ₂	1.503(8)	O ₁	O ₆	3.111(10)
S ₁	C ₁	1.763(14)	O ₁	O ₃	2.944(10)
S ₁	C ₂	1.769(11)	O ₄	O ₅	2.128(12)
S ₂	C ₃	1.742(18)	O ₄	O ₆	3.075(11)
S ₂	C ₄	1.782(18)	O ₅	O ₃	2.844(10)
N ₁	O ₃	1.219(10)	O ₆	O ₃	2.148(11)
N ₁	O ₄	1.277(10)			
N ₁	O ₅	1.244(13)			
N ₂	O ₆	1.272(10)			
N ₂	O ₇	1.220(17)			

表 3 键角数据

原子 I	原子 II	原子 III	键角 (SD)°	原子 I	原子 II	原子 III	键角 (SD)°
O ₃	N ₁	O ₄	121.2(8)	O ₁	Eu	O ₂	76.9(2)
O ₄	N ₁	O ₅	115.2(6)	O ₁	Eu	O ₄	71.8(2)
O ₃	N ₁	O ₅	123.6(8)	O ₁	Eu	O ₃	83.2(3)
O ₆	N ₂	O ₇	122.4(6)	O ₁	Eu	O ₃	70.0(2)
O ₆	N ₂	O ₃	115.2(8)	O ₁	Eu	O ₃	78.8(2)
O ₁	S ₁	C ₁	106.1(6)	O ₂	Eu	O ₂	73.7(2)
O ₁	S ₁	C ₂	103.3(4)	O ₂	Eu	O ₃	67.2(2)
C ₁	S ₁	C ₂	98.4(7)	O ₃	Eu	O ₃	64.7(2)
O ₂	S ₂	C ₃	104.7(9)	O ₃	Eu	O ₄	69.3(2)
O ₂	S ₂	C ₄	103.5(9)	O ₄	Eu	O ₂	75.1(2)
C ₃	S ₂	C ₄	95.8(9)	O ₃	Eu	O ₃	47.3(3)
S ₁	O ₁	Eu	139.3(3)	O ₆	Eu	O ₃	49.8(2)
S ₂	O ₂	Eu	131.9(3)				

二甲亚砷硝酸铕具有二次轴对称,除了金属原子配置在轴上外,还有一个N和一个O. 它是由两种极不相同的“塔型分子” DMSO 和“面型” NO_3^- 与稀土 Eu 离子以络合方

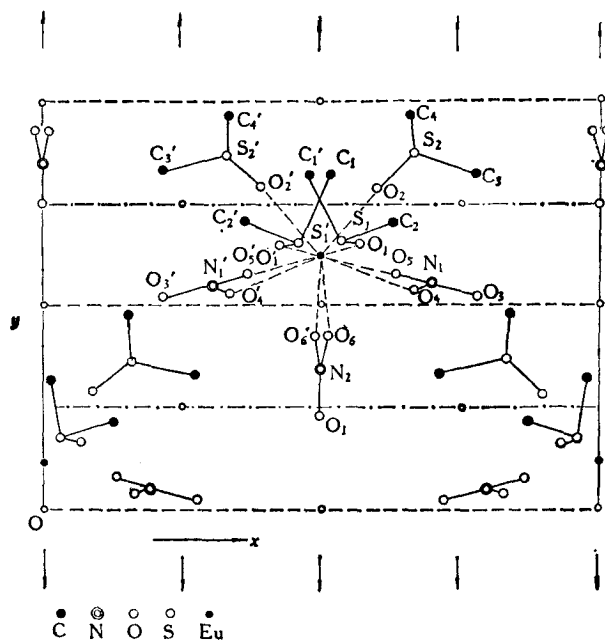


图1 晶体结构在(001)平面上的投影

式组成的. $S-O = 1.512 \text{ \AA}$, $O-S-C = 104.4^\circ$, 这和 $Nd(NO_3)_3 \cdot 4DMSO$ 完全相同, 但 $S-C = 1.764 \text{ \AA}$, $C-S-C = 97.1^\circ$, 均比 $Nd(NO_3)_3 \cdot 4DMSO$ 为小.

稀土元素作为中心阳离子, 与周围近邻的氧成键, 其中有 4 个 O 来自 DMSO, 另外 6 个 O 属于硝酸根. $Eu-O = 2.515 \text{ \AA}$, $O-Eu-O = 73^\circ$, 这与类似晶体的化学键数据相符^[6,7]. 因此, 共有 10 个 O 围绕着 Eu 构成十配位的十二面体加两个面心 (图 2). 它像“劈裂的五角双锥”: 沿 O_4O_5 , “劈成” $O_1-O_2O_2'O_5'O_6O_4$ 和 $O_1'-O_2O_2'O_4'O_6'O_5$ 两单锥, 其中由“共边” O_2O_2' 把它们连在一起. 锥顶 (O_1 和 O_1') 和“共边”上的氧属于 DMSO, 其它三对氧 (O_5O_4 , O_5' , O_4' 和 O_6O_6') 均属于硝酸根.

最后应该指出, 在 $Eu(NO_3)_3 \cdot 4DMSO$ 中, $Eu-O_{DMSO} = 2.38 \text{ \AA}$, 比 $Eu-O_{NO_3} = 2.61 \text{ \AA}$ 为短, 这与晶体发光研究的结论相一致^[4], 也与 $Nd(NO_3)_3 \cdot 4DMSO$ 的结果 ($Nd-O_{DMSO} = 2.37 \text{ \AA}$, $Nd-O_{NO_3} = 2.64 \text{ \AA}$) 相近, 而平均 $Ln-O$ 键长 (Ln 为稀土离子), 前者小于后者, 恰好是“镧系收缩理论”的一个表现.

苏铮同志对本工作提供有益的建议, 吕玉华同志提供晶体, 伍伯牧、窦士琪同志为我们仔细收集强度数据, 吉林工业大学 RQ-16 机组的同志为我们计算提供方便, 在此一并致谢.

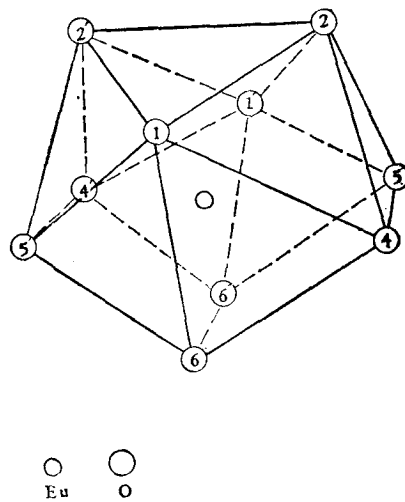


图2 Eu 的十配位构型图

参 考 文 献

- [1] S. K. Ramalingam, S. Soundarejan; JINC 21. (1967), 1763.
[2] K. Krishna Bhandary & H. Manohar, *Indian Journal of Chemistry*, **9**(1971), 275.
[3] Л. А. Асланов, Л. И. Солева, М. А. Порай-Кошиц и С. С. Гоухберг, *Ж. Структурной Химии*, **13** (1972), 655.
[4] 苏锵、吕玉华、应化集刊, 待发表.
[5] J. A. Ibers, W. C. Hamilton, "International Tables for X-ray Crystallography" Vol. IV. The International Union of Crystallography by The Kynoch Press Birmingham, England. (1974), 99—101.
[6] 林永华、莫志深、邢彦, 化学学报, **34**(1976), 176.
[7] 林永华、刘书珍、胡宁海、周清廉, 物理学报, **30**(1981), 709.

CRYSTAL STRUCTURE OF DIMETHYL SULPHOXIDE
COMPLEX OF EUROPIUM

LIN YONG-HUA HU NING-HAI LIU SHU-ZHEN ZHOU QING-LIAN

WU SHI-XUE WANG MING-YI SHI EN-DONG

(Changchun Institute of Applied Chemistry, Academia Sinica)

ABSTRACT

The crystal of dimethyl sulfoxide complex of europium $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 4\text{DMSO}$ belongs to the monoclinic system. The space group is $C_{2/c}-C_{2h}^6$. The crystal parameters are $a = 14.806$ (9) Å, $b = 10.948$ (3) Å, $c = 15.335$ (4) Å and $\beta = 108.07$ (7)°. Four molecules are contained in a unit cell, $z = 4$. The diffraction data have been collected by using PW-1100 four-circle diffractometer, the total number of independent diffractions amounts to 2270. The structure was solved by heavy-atom method, and structure parameters have been refined by means of full-matrix and block-diagonal least square method, $R = 0.069$. The europium ion in this structure is found to be coordinated by ten oxygen atoms. The distances between the europium and the coordinating oxygens are $\text{Eu}-\text{O}_{\text{DMSO}} = 2.38$ Å, $\text{Eu}-\text{O}_{\text{NO}_3} = 2.61$ Å.

气流与化学激光中的碰撞和 非均匀加宽效应——理论分析模型

高 智

(中国科学院力学研究所)

1980年12月24日收到

提 要

本文把用于气流与化学激光性能计算的理论模型作了分析比较,包括常用的 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似^[1]、本文提出的矩形谱线形因子近似以及文献[5]的理论。对气流化学激光的简化扩散混合模型^[1],文中简要地导出了与上述诸理论相对应的具体结果。分析和计算表明:在碰撞与非均匀加宽同时起作用,特别是非均匀加宽占优势的情况下,两种谱线形因子近似以及文献[5]理论的结果三者之间存在显著的差异;矩形谱线形因子近似要比常用的 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似精确,而矩形谱线形因子近似的计算量要比 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似的计算量少。

一、引 言

在气流与化学激光性能的分析 and 计算中,需要正确考虑谱线的碰撞加宽、非均匀即 Doppler 加宽以及自然加宽过程。当气体压力高(对 HF 约在 70 托以上)时以碰撞加宽为主;气体压力低(对 HF 约在 10 托以下)时以 Doppler 加宽为主。通常人们引入 Voigt 型线函数^[1,2]来统一地考虑碰撞和 Doppler 两种加宽过程以及频移(光频相对线形中心的偏离)的联合影响。导出 Voigt 型线函数时^[1,2],假定碰撞加宽线形为 Lorentz 线形, Lorentz 线形在跃迁线形中心附近是准确的,但对偏离线形中心较远的两翼并不准确。

本文进一步考虑采用矩形线形代替真实的谱线形,用矩形谱线形因子来统一地计算碰撞和 Doppler 两种加宽过程以及频移的影响。矩形谱线形因子与 Voigt 型线函数(为了方便起见,称它为 Lorentz-Gauss 谱线形因子)相比,具有简单和计算量少的优点;本文的分析计算表明:对于气流和化学激光的性能计算,采用矩形谱线形因子得到的结果要比 Lorentz-Gauss 谱线形因子的结果精确。

上述两种谱线形因子近似的主要缺陷是假定了发射与吸收能级的所有粒子都可等同地与辐射场发生作用,也就是说假定了发射与吸收能级中不同频率的气体粒子对单色辐射场的贡献相同,这实质上是假定了加宽为均匀加宽。因此它们都不能正确地考虑低压非均匀加宽效应的影响,不能描述低压强激光发射条件下可能出现的“烧孔”现象,因而不

能准确地计算激光功率和强度. 关于激光气体介质性质不随空间和时间而变化的非均匀加宽效应问题, Lamb 理论^[3]及其推广已作了完善的分析. 但是正如文献[4]指出的, 要把 Lamb 理论推广到气体性质随空间和时间而变化的气流与化学激光并不容易. 近来, 文献[4]和文献[5]已提出了用于气流和化学激光的更精确的理论模型. 文献[4]和文献[5]的理论有所不同, 但目的都是为了正确描述具有频率分布的气体粒子和辐射场之间的相互作用, 以便能够正确计算非均匀加宽效应的影响.

本文的主要内容是把矩形谱线形因子近似与常用的 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似^[1]以及与文献[5]的理论作比较, 着重考虑碰撞和 Doppler 加宽同时起作用的情况. 考虑到这些理论的区别主要在于流场、速率过程和辐射交换三个过程之间的耦合模型不同, 因此文中将对流场、分子体系和辐射场本身尽可能地作出简化. 假定扩散混合过程中化学反应提供泵浦作用, 湍流混合取文献[1]介绍的简化模型, 流场参数 ρ , T 和 u 为常数; 分子为二能级体系、两个能级间发生单频激光发射. 结论对于流场参数变化, 分子体系为多能级和多频激光发射的情况同样适用.

二、谱线形因子近似

1. 增益和谱线形

若气体粒子处于静止时的受激辐射频率为 ν_0 , 频率为 ν 处的增益可表示为

$$G_T = \sigma_0 g(\nu, \nu_0)(f_2 - \alpha_1 f_1), \quad (2.1)$$

其中 σ_0 是线形中心频率 ν_0 处的受激辐射截面积, f_2 和 f_1 分别是激光上和下能级的与频率有关的粒子数密度, α_1 是与能级简并度有关的常数, $g(\nu, \nu_0)$ 为谱线形, 对于 Lorentz 线形(图 1), 积分归一的形式为

$$g = g_L(\nu, \nu_0) = \frac{2}{\pi \Delta \nu_N} \left\{ 1 + \left[\frac{2(\nu - \nu_0)}{\Delta \nu_N} \right]^2 \right\}^{-1}. \quad (2.2)$$

这里 $\Delta \nu_N$ 是 Lorentz 加宽线形半峰值处的全宽度.

当用宽度为 $\Delta \nu_N$ 的矩形来代表真实的谱线形时, 积分归一的矩形线形(图 1) $g_R(\nu, \nu_0)$ 为

$$g = g_R(\nu, \nu_0) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta \nu_N} & |\nu - \nu_0| \leq \frac{\Delta \nu_N}{2}, \\ 0 & |\nu - \nu_0| > \frac{\Delta \nu_N}{2}. \end{cases} \quad (2.3)$$

气体粒子处于随机运动之中, 与频率为 ν 辐射发生共振交换的气体粒子, 它们在辐射方向(即 z 方向)的速度分量 v_z 满足关系 $v_z = \frac{c}{\nu}(\nu - \nu_0)$. 当无辐射场时, 气体发射(或吸收)能级的分子速度分布为 Maxwell 分布, 因此可与频率在 ν 到 $\nu + d\nu$ 间隔辐射相共振的分子数目应为 $ng_G(\nu, \nu_0)d\nu$, $g_G(\nu, \nu_0)$ 是积分归一的 Gauss 线形(图 1)

$$g_G(\nu, \nu_0) = \frac{1}{\Delta \nu_D} \left(\frac{4 \ln 2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[- (4 \ln 2) \left(\frac{\nu - \nu_0}{\Delta \nu_D} \right)^2 \right]. \quad (2.4)$$

这里 $\Delta\nu_D$ 是 Doppler 加宽线形半峰值处的全宽度, Gauss 线形是非均匀加宽线形.

2. 增益系数与谱线形因子

对于分子气体体系, 在高气压时谱线的加宽以碰撞加宽为主, 低气压时以 Doppler 加宽为主, 中等压力范围条件下两种加宽过程同时起作用. 在碰撞加宽线形(取 Lorentz 线形)上叠加以 Gauss 线形, 对分子表观频率在 $-\infty$ 到 ∞ 的范围内积分, 得到线形中心频率为 ν_0 的分子气体体系对频率为 ν 辐射的增益(或吸收)系数 G 为

$$G = \sigma\varphi(\nu, \nu_0)(n_2 - \alpha_1 n_1), \quad (2.5)$$

$$\varphi = \varphi_{L-G}(\nu, \nu_0). \quad (2.6)$$

这里 σ 是受激辐射截面积, n_2 和 n_1 是上和下能级的粒子数密度, 设 α_1 与分子表观频率无关, φ 是归一的谱线形因子(无量纲), Lorentz-Gauss 谱线形因子 φ_{L-G} 为

$$\varphi_{L-G}(\nu, \nu_0) = \frac{\eta^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\eta^2 + (\xi - t)^2} dt, \quad (2.7)$$

其中

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{2(\nu - \nu_0)}{\Delta\nu_D} (\ln 2)^{\frac{1}{2}}, \quad \eta = \frac{\Delta\nu_N}{\Delta\nu_D} (\ln 2)^{\frac{1}{2}}, \\ t &= \frac{2(\nu' - \nu_0)}{\Delta\nu_D} (\ln 2)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

这里 ν' 是分子的表观频率, ξ 和 η 分别是频移(光频相对线形中心频率的偏移)参数和加宽参数. 当频移 $\xi = 0$ 时, φ_{LR} 简化为

$$\varphi_{LR}(\nu_0, \nu_0) = \eta \sqrt{\pi} e^{\eta^2} (1 - \operatorname{erf} \eta). \quad (2.9)$$

在矩形线形上叠加以 Gauss 线形, 对分子表观频率从 $-\infty$ 到 ∞ 取积分, 得到线形中心频率为 ν_0 的分子气体体系对频率为 ν 辐射的增益系数的表达式仍为(2.5)式, 但这时 $\varphi = \varphi_{RE}(\nu, \nu_0)$, φ_{RE} 是归一的矩形谱线形因子(无量纲)

$$\varphi_{RE}(\nu, \nu_0) = \frac{1}{2} [\operatorname{erf}(\xi + \eta) - \operatorname{erf}(\xi - \eta)]. \quad (2.10)$$

矩形谱线形因子 φ_{RE} 与 Lorentz-Gauss 谱线形因子 φ_{L-G} 的比较见图 2. 对于低压 $\eta \ll 1$ 的情况, φ_{RE} 和 φ_{L-G} 均与 η 成正比; 当 $\eta \rightarrow 0$ 时, φ_{RE} 和 φ_{L-G} 均趋向于零, 且比值 $\frac{\varphi_{RE}}{\varphi_{L-G}}$ 趋向于 0.637; 对于高压 $\eta \gg 1$ 的条件,

$\varphi_{RE} > \varphi_{L-G}$, 且当 $\eta \rightarrow \infty$, φ_{RE} 和 φ_{L-G} 均趋向于 1, 即趋向于均匀加宽极限, 均匀加宽的谱线形因子 φ_h 为

$$\varphi_h(\nu, \nu_0) = 1. \quad (2.11)$$

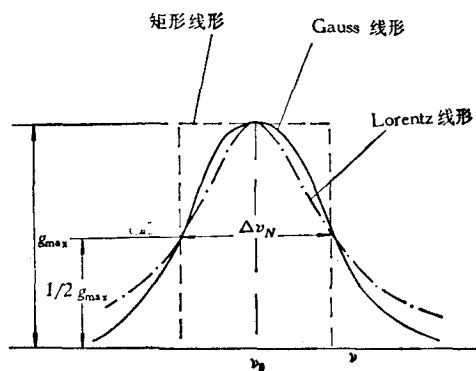


图 1

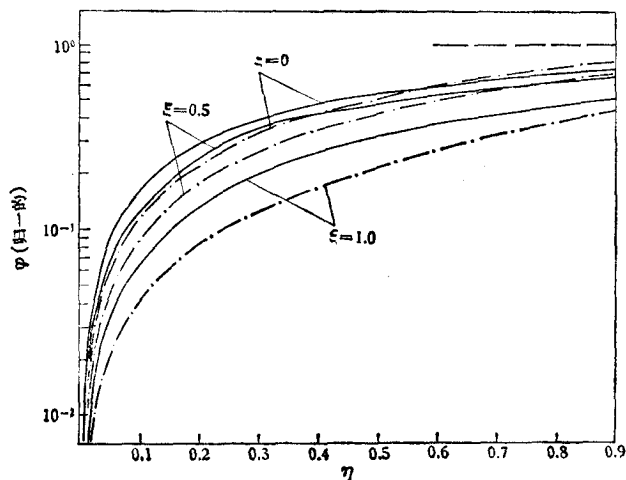


图 2

——为 Lorentz-Gauss 线形；- · - 为矩形线形；——为均匀加宽极限

3. 谱线形因子近似的理论计算模型

为了计算气流与化学激光的强度和功率等特性，需要联立求解包括谱线形因子的速率方程组、辐射交换以及流体力学方程组^[4]。按照引言中的说明，为了清楚地说明采用不同耦合模型进行计算时将造成多大的强度和功率等特性的差异，最好先把流场、辐射场和速率过程本身尽可能地化简。这里考虑 HF 冷反应系统，采用文献[1]中介绍的简化混合模型(图 3)，氧化剂和燃料喷管流以相同的压力和速度流入光腔并进行射流混合，忽略化学反应热的影响，流场参数 p 、 T 和 u 在流动方向以及垂直方向上均无变化，对于二能级体系和单频激光发射，速率方程组可写为^[4]

$$\begin{aligned} \frac{dn_2}{d\zeta} &= Kn_F - n_2 - \sigma\varphi(\nu, \nu_0)(n_2 - \alpha_1 n_1) \frac{J}{h\nu k_{cd}}, \\ \frac{d(n_1 + n_2)}{d\zeta} &= -\frac{dn_F}{d\zeta} = Kn_F, \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中 $\zeta = k_{cd}x/u$ ， $K = k_p n_{H_2}/k_{cd}$ ， k_p 和 k_{cd} 分别为泵浦和碰撞去活化速率， n_{H_2} 和 n_F 分别是 H 和 F 的粒子数密度， $(n_1 + n_2)$ 是 HF 的粒子数密度， $h\nu$ 为一个光子的能量， J 为辐射强度。

在射流并合 $\zeta \leq \zeta_D$ (图 3) 前的自由混合阶段，混合层的厚度 δ 为

$$\delta = A\zeta^m. \quad (2.13)$$

A 为半经验常数^[4]，对于湍流和层流混合， m 分别等于 1 和 1/2。在射流并合 $\zeta \geq \zeta_D$ 后的混合层被限制在氧化剂和燃料射流中心线之间，即 $0 \leq y \leq h$ 的区域， $\delta = h$ 。对于积分增益 G ^[4]

$$G = \begin{cases} \int_0^{\delta(x)} \sigma\varphi(n_2 - \alpha_1 n_1) dy & x \leq x_D, \\ \int_0^h \sigma\varphi(n_2 - \alpha_1 n_1) dy & x \geq x_D. \end{cases} \quad (2.14)$$

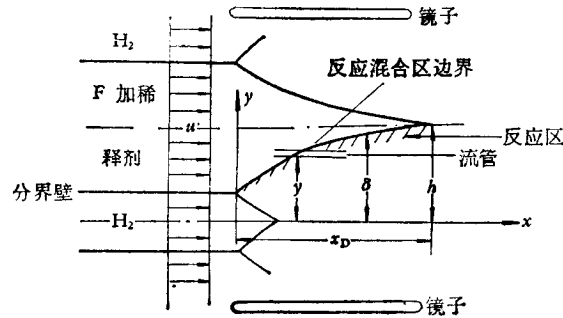


图3 流动混合简化图案(取自文献[1])

由(2.12), (2.13)和(2.14)式, 导出 G 满足的关系为

$$\bar{G} = \frac{\bar{G}_{on}\varphi}{1 + \varphi\bar{I}}, \quad (2.15)$$

其中 $\varphi = \varphi_{L-G}$ 或 φ_{RE} 或 φ_h , $\bar{G} = \frac{G}{\sigma A n_F^0}$, $\bar{I} = \frac{\sigma(1 + \alpha_1)J}{h\nu k_{cd}}$,

$$\bar{G}_{on} = \begin{cases} \left[\frac{m}{K} (K + \alpha) e^{-K\zeta} \int_0^{\zeta} e^{\tau} z^{m-1} dz - \zeta^m \right] - \frac{1}{A n_F^0} \frac{d(n_2 - \alpha_1 n_1)}{d\zeta}, \\ \left[\frac{m}{K} (K + \alpha) e^{-K\zeta} \int_0^{K\zeta_D} e^{\tau} z^{m-1} dz - \zeta_D^m \right] - \frac{1}{A n_F^0} \frac{d(n_2 - \alpha_1 n_1)}{d\zeta}. \end{cases} \quad (2.16)$$

这里右上角标 0 表示混合开始, 即 $x = 0$ 位置处的条件, 对转动量子数不大的振动-转动跃迁有 $\alpha_1 \approx 1$ ^[1]. 激光发射 $J \approx 0$ 时, J 的值有限, 意味着积分增益应与镜子处的光能损耗 $\bar{G}_c$ 相等, 即 $\bar{G} = \bar{G}_c$, 通常假定损耗随 x 的变化可以忽略^[1], 故当 $J \approx 0$ 时, $\bar{G} = \bar{G}_c$ 和 $\frac{d(n_2 - \alpha_1 n_1)}{d\zeta} \approx 0$ 同时成立.

由基本解(2.15)式可知, 若取 $\bar{G}_\varphi = \bar{G}_c / \varphi(\xi, \eta)$ 为新参变数, 矩形、Lorentz-Gauss 和均匀谱线形因子近似的三个关系式即可化为同一个, 无量纲强度 $\bar{I}\bar{G}_c$ 为

$$\bar{I}\bar{G}_c = \bar{G}_{on} - \bar{G}_\varphi. \quad (2.15a)$$

对 $m = 1$ 的湍流混合情况, 得到具体关系式为

$$\bar{I}\bar{G}_c = \begin{cases} \left[\frac{(K+1)}{K} (1 - e^{-K\zeta}) - \zeta \right] - \bar{G}_\varphi & \zeta \leq \zeta_D, \\ \left[\frac{K+1}{K} e^{-K\zeta} (e^{K\zeta_D} - 1) - \zeta_D \right] - \bar{G}_\varphi & \zeta \geq \zeta_D. \end{cases} \quad (2.17)$$

功率 $P = 2N h \nu \int_0^x G I dx$ 的无量纲值 $\bar{P}$ 为

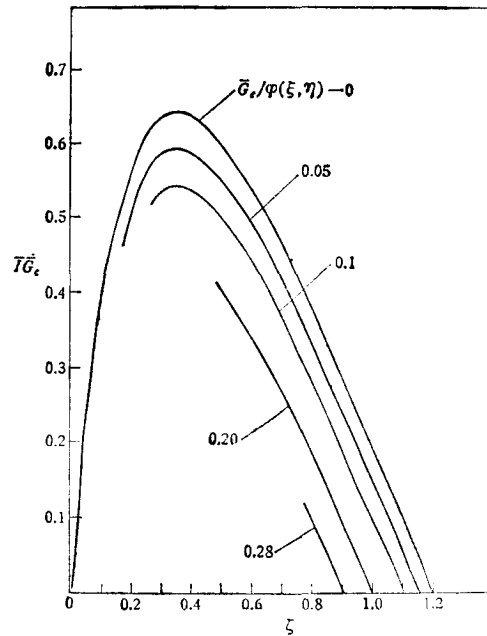


图4

$$\bar{P} = \left\{ \left[\frac{K+1}{K} \left(\zeta + \frac{e^{-K\zeta}}{K} \right) - \frac{\zeta^2}{2} \right] - \bar{G}_\varphi \zeta \right\} \Big|_{\zeta_i}^{\zeta} \quad \zeta_i \leq \zeta \leq \zeta_D, \quad (2.18a)$$

$$\bar{P} = \bar{P}(\zeta_D) + \frac{1+K}{K^2} (1 - e^{-K\zeta_D}) [1 - e^{-K(\zeta - \zeta_D)}] - (\zeta_D + \bar{G}_\varphi)(\zeta - \zeta_D)$$

$$\zeta \geq \zeta_D \text{ 和 } \zeta_i \leq \zeta \leq \zeta_e. \quad (2.18b)$$

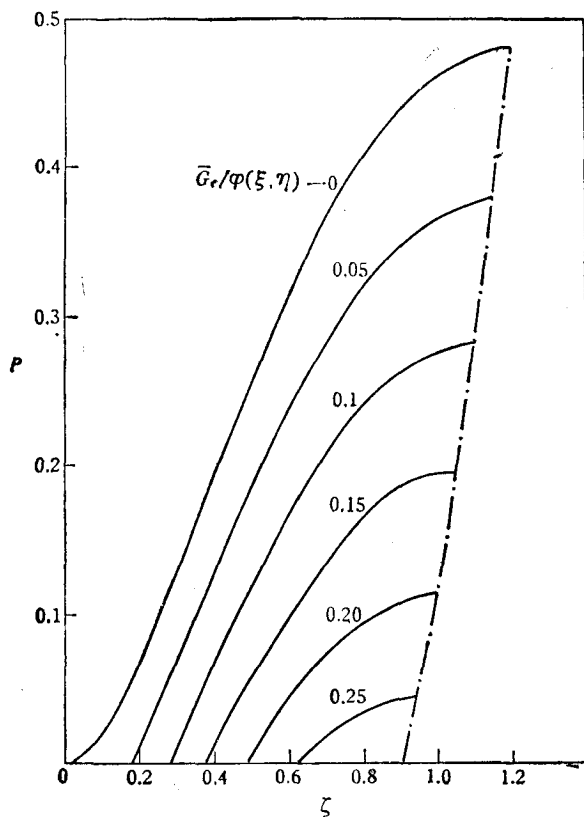


图 5

这里 N 是喷管阵列的氧化剂喷管数目, h_z 是与流向 x 和光轴相垂直方向的喷管高度. (2.17) 和 (2.18) 式表明: 频移、压力和耗损存在“相似”关系; 更精确的理论^[5]表明: 在非均匀加宽占优势的条件下, “相似”关系并不成立. 图 4 和图 5 分别是 $\bar{I}\bar{G}_c$ 和功率 $\bar{P}$ 随 ζ 变化的关系曲线 ($K=5$), 图 6 是总功率 $\bar{P}_e$ 随 $\bar{G}_\varphi$ 变化的关系曲线, 图 4 至图 6 给出的曲线对三个谱线形因子近似是通用的.

由于 $\bar{G}_c$ 和 $\bar{G}_{on}$ 均是和谱线形因子无关的量, 故根据 (2.15) 式还可导出如下关系:

$$\bar{I}_{L-G} - \bar{I}_{RE} = \frac{1}{\varphi_{RE}} - \frac{1}{\varphi_{L-G}}, \quad (2.19)$$

$$\bar{I}_h - \bar{I}_{L-G} = \frac{1}{\varphi_{L-G}} - 1, \quad (2.20)$$

其中 $\bar{I}_{L-G}$, $\bar{I}_{RE}$ 和 $\bar{I}_h$ 分别是 Lorentz-Gauss、矩形和均匀加宽谱线形

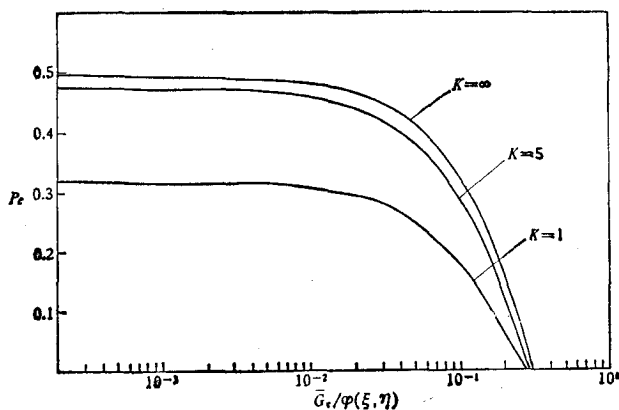


图 6

因子近似所对应的无量纲辐射强度. 图 7 给出 $(\bar{I}_{L-G} - \bar{I}_{RE})$ 随加宽参数 η 变化的关系曲线; 在碰撞和 Doppler 加宽同时起作用、特别是 Doppler 加宽占优势的压强范围内, $\bar{I}_{RE}$ 恒小于 $\bar{I}_{L-G}$, 且差 $(\bar{I}_{L-G} - \bar{I}_{RE})$ 的值随 ξ 的增大而增大. $(\bar{I}_h - \bar{I}_{L-G})$ 随 η 和 ξ 变化的关系曲线的情况完全与 $(\bar{I}_{L-G} - \bar{I}_{RE})$ 相似. 顺便指出: 在高压 $\eta \gg 1$ 的条件下, 由于 $\varphi_{RE} > \varphi_{L-G}$, 因此 $(\bar{I}_h - \bar{I}_{RE}) < (\bar{I}_h - \bar{I}_{L-G})$, 就是说矩形谱线形因子近似比 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似更快地趋向均匀加宽极限.

此外, 在(2.17)和(2.18)式中均包含激光发射的起始位置 ζ_i 和终止位置 ζ_e , 由(2.15)式求得 ζ_i 和 ζ_e 满足如下的关系:

$$\bar{G}_e = \varphi \left[\frac{2K}{K-1} (1 - e^{-\zeta_i}) - \frac{K+1}{K(K-1)} (1 - e^{-K\zeta_i}) - \zeta_i \right]; \quad (2.21)$$

$$\bar{G}_e = \begin{cases} \varphi \left[\frac{K+1}{K} (1 - e^{-K\zeta_e}) - \zeta_e \right] & \zeta_e \leq \zeta_D, \\ \varphi \left[\frac{K+1}{K} e^{-K\zeta_e} (e^{K\zeta_D} - 1) - \zeta_D \right] & \zeta_e \geq \zeta_D. \end{cases} \quad (2.22)$$

(2.21)和(2.22)式中, $\bar{G}_e$ 和 $\varphi(\xi, \eta)$ 仍可结合成一个变数即 $\bar{G}_\varphi$, 因此激光发射的起始位置 ζ_i (或终止位置 ζ_e) 在三个谱线形因子的近似中是互不相同的. 这个问题后面还要讨论.

三、更精确的理论

谱线形因子近似的主要缺陷是假定了发射和吸收能级中频率不同的分子对单色辐射场具有相同的贡献; 实际当谱线的加宽以 Doppler 加宽为主时, 仅当粒子的速度使其受激发射的频率与光腔的共振频率相一致时, 这些粒子才会对该频率的辐射产生贡献, 换言之, 每一共振频率可消耗掉速度为 $+v_x$ (沿光轴方向) 和速度为 $-v_x$ 的两群粒子. 因而在阈值以上的所有共振频率上, 一个共振将在增益线形上“烧出”两个孔来, 当共振频率与线形中心频率一致时, “烧出”一个孔. 激光的功率与对辐射有贡献的粒子总数成正比, 即与增益曲线上的“烧孔”面积成正比. 谱线形因子近似显然不能考虑“烧孔”现象. 适用于碰撞和非均匀加宽过程同时起作用, 能够计算“烧孔”效应的更精确的理论模型有文献[4]和

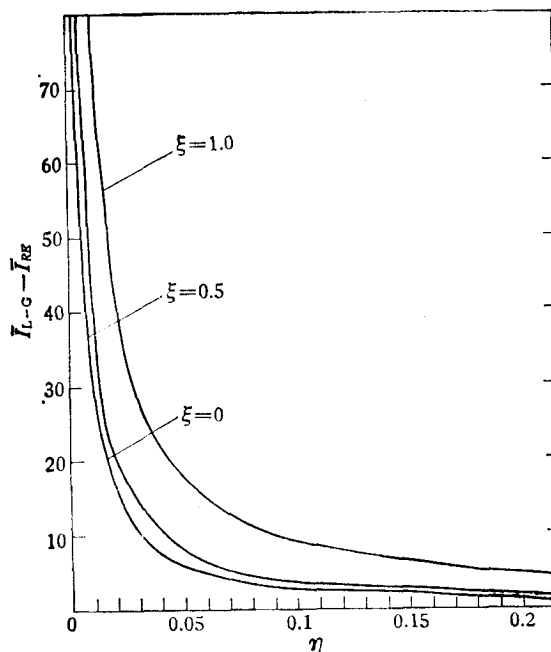


图 7

[5]的理论. 下面针对本文所考虑的情况, 简要地导出文献[5]理论的相应结果, 并把它们与上节谱线形因子近似的结果作比较.

1. 文献[5]理论的相应结果

文献[5]理论的要点是: 取描述能级粒子速度分布函数变化的运动论方程组为基本方程组, 引进与分子表观频率有关的增益系数 G_T ; 求出 G_T 和能级速度分布函数的双参数摄动解, 以及增益和强度之间的关系式, 由此亦可求得流场参数(若考虑气流参数的变化). 当忽略能级粒子速度分布函数沿光轴方向的变化; 对混合流场、辐射场和分子气体体系采用上节所述的简化; 假定弹性与非弹性碰撞速率 k_e 和 k_{ed} 均与运动分子的表观频率无关, 泵浦反应的生成项为 Maxwell 分布; 采用 B-G-K 弛豫模型^[8]代替玻耳兹曼弹性碰撞积分, 并类似地利用弛豫模型表示非弹性碰撞项; 流场变数 p , T 和 u 不随时间而变化时, 运动论方程组可以写成

$$\begin{aligned} u \frac{\partial f_2}{\partial x} &= k_p n_{H_2} n_F g_G(v', v_0) - k_{ed} f_2 + k_e (\bar{f}_2 - f_2) - \sigma g_L(v', v) (f_2 - f_1) \frac{J}{h\nu}, \\ u \frac{\partial f_1}{\partial x} &= k_{ed} f_2 + k_e (\bar{f}_1 - f_1) + \sigma g_L(v', v) (f_2 - f_1) \frac{J}{h\nu}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

其中 $f_i (i = 1, 2)$ 是 i 能级粒子速度分布函数(即 i 能级粒子在频率 ν' 处的数密度), $\bar{f}_i$ 为 f_i 的平衡 Maxwell 分布, 即 $\bar{f}_i = n_i g_G(v', v_0)$. 文献[5]引进的与分子表观频率有关的增益系数 G_T 即(2.1)式. 由(3.1)式导出控制 G_T 的变化方程为

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{G_T}{\sigma g_L} \right) &= k_p n_{H_2} n_F g_G(v', v_0) + k_e [(\bar{f}_2 - f_2) - (\bar{f}_1 - f_1)] \\ &\quad - 2k_{ed} f_2 - 2G_T \frac{J}{h\nu}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

下面求方程组(3.1)和(3.2)的双参数摄动解, 把未知的分布函数展开成如下的双重级数:

$$f_i = \sum_{j=0} \sum_{k=0} \left(\frac{u}{L k_e} \right)^j \left(\frac{u}{L k_e} \right)^k f_i^{jk}. \quad (3.3)$$

这里 k_e 是辐射特征速率, L 是流动方向特征长度. 由(3.1)和(3.3)式求得零级关系为

$$\begin{aligned} f_2^{00} - f_1^{00} &= (\bar{f}_2^{00} - \bar{f}_1^{00}) \left(1 + \frac{2\sigma}{h\nu k_e} g_L J \right)^{-1}, \\ \bar{f}_2^{00} - f_2^{00} &= \frac{\sigma J}{h\nu k_e} g_L (f_2^{00} - f_1^{00}) \approx 0, \\ \bar{f}_1^{00} - f_1^{00} &= -\frac{\sigma J}{h\nu k_e} g_L (f_2^{00} - f_1^{00}) \approx 0, \\ G_T^{00} &= \sigma g_L(v', v) (f_2^{00} - f_1^{00}), \end{aligned} \quad (3.4)$$

f_i^{00} 的解为 Chapman-Enskog 解^[8], 在流场变数空间梯度为零的条件下, $f_i^{00} = 0$; G_T^{00} 对分子表观频率积分得到的结果正是 Lorentz-Gauss 谱线形因子. 我们发展比 G_T^{00} 更精确的 G_T 的半阶解 $G_T^{\frac{1}{2}}$, 为此利用如下的关系式^[5-7], 当 $J \approx 0$,

$$\frac{1}{L_2} \int_0^{L_2} \int_{-\infty}^{\infty} G_T d\nu' dy = -\frac{1}{2} \ln R_1 R_2. \quad (3.5)$$

这里 y 是光轴方向, L_2 为镜子之间的距离, R_1 和 R_2 是两面镜子的反射率. 通常认为镜面处的耗损与 x 无关^[5], 因而 R_1 和 R_2 均与 x 无关; 进一步考虑到分子热速度因而表观频率与空间坐标无关, G_T 应与坐标 x 无关, 故有 $\frac{\partial G_T}{\partial x} \approx 0$, 于是由(3.2)式求得 G_T 的半阶解 G_T^0 , 以及与半阶解 G_T^0 相应的积分增益 $G'_T = \int_0^{\delta(x)} G_T^0 dy \quad (x \leq x_D); \int_0^h G_T^0 dy \quad (x \geq x_D)$ 为

$$G'_T = \frac{G_{on}(\xi) g_G(\nu', \nu_0)}{1 + \left[\frac{2(\nu - \nu')}{\Delta\nu_N} \right]^2 + \bar{I}}, \quad (3.6)$$

把(3.6)式对分子表观频率积分得到

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{\infty} G'_T d\nu' = \frac{\bar{G}_{on}(\xi) \varphi(\xi, \eta, \bar{I})}{1 + \bar{I}(\xi)}, \quad (3.7)$$

其中

$$\varphi(\xi, \eta, \bar{I}) = \frac{\eta^2(1 + \bar{I})}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\eta^2(1 + \bar{I}) + (\xi - t)^2} dt. \quad (3.8)$$

$\bar{G}_{on}(\xi)$ 和 $\bar{I}$ 的具体表达式见(2.15)和(2.16)式. 显然 $\varphi(\xi, \eta, 0) = \varphi_{L-G}$, 见(2.7)式. (3.7)式是文献[5]理论应用于本文算例时得到的基本关系式, (3.7)式与谱线形因子近似的基本关系式(2.15)式是相对应的. 同样地, 在(3.7)式中当 $\bar{I} \approx 0$ 时, $\bar{G} = \bar{G}_c$ 和 $\frac{d(n_2 - \alpha_1 n_1)}{d\xi} \approx 0$ 同时成立. 此外, (3.6)式给出了 ξ 位置处、频率为 ν 处的增益, 表观频率 $\nu' = \nu$ 位置具有最大增益 $G'_{T, \max} = G_{on}(\xi) g_G(\nu, \nu_0) (1 + \bar{I})^{-1}$, 增益为峰值之半即 $\frac{1}{2} G'_{T, \max}$ 处的表观频率 ν' 可由(3.6)式求出, 增益线形半峰值处的全宽度为 $\Delta\nu_N (1 + \bar{I})^{\frac{1}{2}}$.

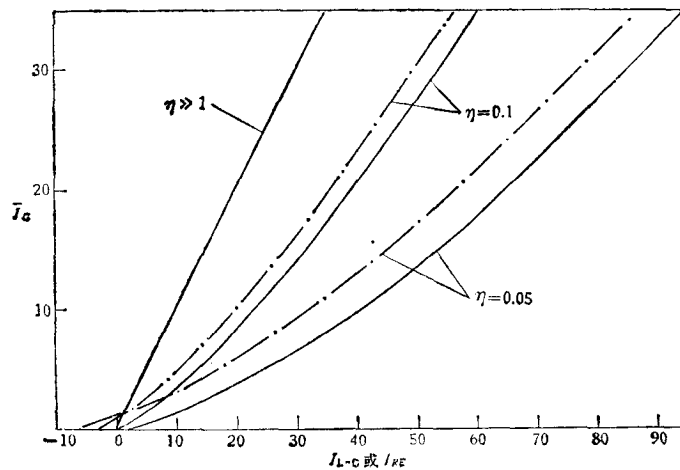


图8 —为 $I_G \sim I_{L-G}$; - - 为 $I_G \sim I_{RE}$; $\xi = 0$

即随辐射强度的增加“烧孔”宽度也增加. 根据(3.7)式容易看出, 对 Doppler 加宽, 增益系数按 $(1 + \bar{I})^{-\frac{1}{2}}$ 方式饱和; 对均匀加宽, 增益系数按 $(1 + \bar{I})^{-1}$ 方式饱和. 关系式(3.6)和(3.7)定性地适用于多能级情况^[6,7].

2. 文献[5]理论与诸谱线形因子近似的比较

(1) 把关系式(2.15)和(3.7)作比较, 消去公因子 $\bar{G}/\bar{G}_{0n}$, 求得

$$\frac{\varphi_{L-G}}{1 + \varphi_{L-G}\bar{I}_{L-G}} = \frac{\varphi_{RE}}{1 + \varphi_{RE}\bar{I}_{RE}} = \frac{1}{1 + \bar{I}_h} = \frac{\varphi(\xi, \eta, \bar{I}_G)}{1 + \bar{I}_G}. \quad (3.9)$$

这里 $\bar{I}$ 的足标 L-G, RE, h 和 G 分别指 Lorentz-Gauss、矩形和均匀加宽谱线形因子以及文献[5]的理论; 类似地, 下面在功率、激光发射的起始和终止位置的书写中都将使用这样的足标. 在高气压 $\eta \gg 1$ 的条件下, $\varphi(\xi, \eta, \bar{I}_G) \approx \varphi_{L-G} \approx \varphi_{RE} \approx 1$, 故矩形、Lorentz-Gauss 谱线形因子近似以及文献[5]理论三者相一致, 且随气压因此随 η 的增加三者均趋向于均匀加宽谱线形因子近似的结果.

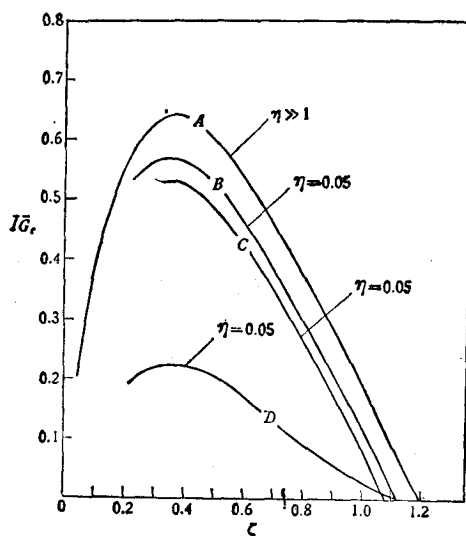


图 9

$\xi = 0.5$; $K = 5.0$; $\bar{G}_c = 5 \times 10^{-3}$; $\xi_c < \xi_D$; A 为均匀加宽谱线形因子; B 为 L-G 谱线形因子; C 为矩形谱线形因子; D 为文献[5]理论

对于中等压力即碰撞和 Doppler 加宽过程同时起作用, 特别是低压 Doppler 加宽占优势的情况, $\bar{I}_{L-G}$, $\bar{I}_{RE}$ 和 $\bar{I}_G$ 三者彼此相差较大, 矩形和 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似都不能正确计算非均匀加宽效应的影响, 在辐射强度因而在功率的计算中均会引起较大的偏差, 偏差大小的具体数值例子见图 8—10. 图 8 是 $\bar{I}_G$ 与 $\bar{I}_{L-G}$ 以及 $\bar{I}_G$ 与 $\bar{I}_{RE}$ 的关系曲线, 如对 $\bar{I}_G = 3$, $\xi = 0.5$, $\eta = 0.05$ 时 $\bar{I}_{L-G} \approx 16$, $\bar{I}_{RE} \approx 9$; 而 $\eta = 0.1$ 时, $\bar{I}_{L-G} \approx 9$, $\bar{I}_{RE} \approx 5.5$; $\eta \gg 1$, $\bar{I}_G = \bar{I}_{L-G} = \bar{I}_{RE}$. 图 9 是 $\bar{G}_c \bar{I}_G$, $\bar{G}_c \bar{I}_{RE}$, $\bar{G}_c \bar{I}_{L-G}$ 和 $\bar{G}_c \bar{I}_h$ 随 ξ 变化的关系曲线. 图 10 给出四个理论算出的功率 $\bar{P}_e$ 随 $\bar{G}_c$ 变化的关系曲线, $\bar{G}_c = 0.01$, $\bar{P}_G : \bar{P}_{RE} : \bar{P}_{L-G} : \bar{P}_h \approx 1 : 1.7 : 4.4 : 10$; $\bar{G}_c = 0.001$, $\bar{P}_G : \bar{P}_{RE} : \bar{P}_{L-G} : \bar{P}_h \approx 1 : 1.4 : 1.5 : 1.6$; $\bar{G}_c \rightarrow 0$

时四个理论算出的功率趋向于同一极限值.

对于高强度发射, 即使气压不很高, 而当 $\varphi_{RE}\bar{I}_{RE} \gg 1$ (因而 $\varphi_{L-G}\bar{I}_{L-G} \gg 1$), $\eta(1 + \bar{I}_G)^{\frac{1}{2}} \gg |\xi - 1|$ 的条件成立时, 由(3.9)式推出 $\bar{I}_{L-G} \approx \bar{I}_{RE} \approx \bar{I}_G \approx \bar{I}_h$, 即有 $\bar{P}_{L-G} \approx \bar{P}_{RE} \approx \bar{P}_G \approx \bar{P}_h$. 不过应当指出: 对于这种高强度发射, 需要进一步考虑交叉弛豫(即弹性碰撞弛豫)速率为有限值, 以及转动弛豫速率为有限值的影响.

(2) 对于弱强度 $\bar{I} \ll 1$ 的发射, 在 Doppler 加宽占优势, 即 $\eta \ll 1$ 以及频移 $\xi = 0$ 的条件下, 从(2.15)和(3.7)式出发可导出

$$\bar{I}_G \approx 2\eta \sqrt{\pi} \bar{I}_{L-G}. \quad (3.10)$$

这一简单的关系说明: 与更精确的理论^[5]相比, Lorentz-Gauss 谱线形因子近似引起的偏

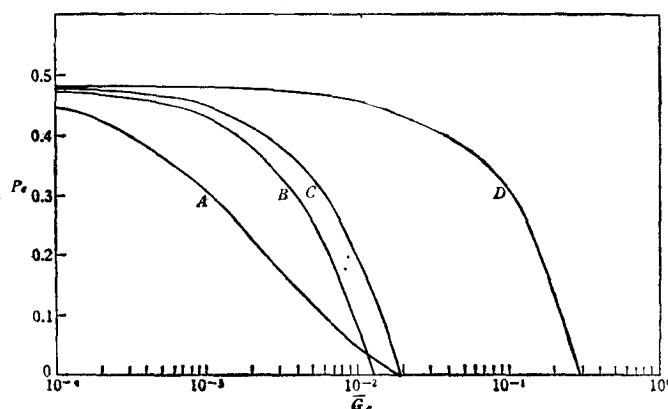


图 10

$K = 5$; 曲线 A, B 和 C : $\eta = 0.05$, $\xi = 0.5$; 曲线 D : $\eta \gg 1$; A 为文献[5]理论; B 为矩形谱线形因子; C 为 $L-G$ 谱线形因子; D 为均匀谱线形因子

差,随气压减低而单调增大。

(3) 此外,激光发射在气流方向即 x 方向的起始位置 ζ_i 和发射终止位置 ζ_e ,在四个理论中它们满足如下关系:

$$\zeta_{i,RE} > \zeta_{i,L-G} = \zeta_{i,G} > \zeta_{i,h}, \quad (3.11)$$

$$\zeta_{e,RE} < \zeta_{e,L-G} = \zeta_{e,G} < \zeta_{e,h}. \quad (3.12)$$

四、结 束 语

对于碰撞与 Doppler 加宽同时起作用,特别是 Doppler 加宽占优势的情况,诸谱线形因子近似以及文献[5]理论算出的气流与化学激光的性能存在相当的差异;矩形谱线形因子近似与常用的 Lorentz-Gauss 谱线形因子近似相比,从计算精确度和节省计算时间两方面来看矩形近似都是可取的;考虑到对于偏离线形中心的线形两翼, Lorentz 线形并不精确,碰撞线形的进一步精确化,以及交叉(平动)弛豫和转动弛豫的影响都值得进一步考虑。

参 考 文 献

- [1] R. W. F. Gross, J. F. Bott, "Handbook of Chemical Lasers", Wiley, New York, (1976).
- [2] B. H. Armstrong, *J. Quan. Spectro. & Radi. Trans.*, 7(1) (1967), 61.
- [3] W. E. Lamb, Jr., *Phys. Rev. A*, 134(1964), 1429.
- [4] H. Mirels, *J. AIAA*, 17(5) (1979), 478.
- [5] 高智, "辐射非平衡流的运动论研究及对气流激光的应用", 第二届全国流体力学会议资料, 1979年5月, 无锡; Gao Zhi, "A Kinetic Approach to Nonequilibrium Flow with Application to Gas Flow Lasers" (In: Proceedings of First Asian Congress of Fluid Mechanics, Dec. (1980), India).
- [6] Gao Zhi, Zhao Lie, E Xue-quan, "Generalized Kinetic Model of CW Flow Chemical Lasers" (to be Published in Proceedings of International Laser Congress, May, (1980) Shanghai-Peking, China).
- [7] 高智、鄂学全, 中国科学, 1981, 11.

- [8] W. G. Vincenti, C. H. Kruger, Jr., "Introduction to Physical Gas Dynamics". Wiley, New York, (1965).

COLLISIONAL AND INHOMOGENEOUS BROADENING EFFECTS IN GAS-FLOW AND CHEMICAL LASERS—THE THEORETICAL MODELS

GAO ZHI

(*Institute of Mechanics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

The analytical models which are used to predict the performance of gas-flow and chemical lasers are enumerated and compared. These analytical models include the currently accepted theory of Lorentz-Gauss line shape factor, the present theory of rectangular line shape factor and the theory presented in ref. [5]. For the idealized configuration of the mixing layer of diffusion chemical lasers⁽¹⁾, the specific results corresponding to the theories mentioned above are developed in brief. Analysis shows that for the general case in which the transition is simultaneously inhomogeneous broadened and collisionally broadened, particularly for the case in which the inhomogeneous broadening is dominant, the difference among the results of the two theories of line shape factor and the theory of article [5] are quite significant. The results of the theory of rectangular line shape factor are more precise than those of Lorentz-Gauss line shape factor. And the computing-time required by the theory of rectangular line shape factor is less than that of Lorentz-Gauss line shape factor.

锥形梯度折射率纤维的成像特性

殷宗敏 祝颂来

(中国科学院西安光学精密机械研究所)

1981年3月30日收到

提 要

本文从光线轨迹方程出发,推导了锥形梯度折射率纤维的物像关系式,并得出了它的等效焦距和主平面位置。在 $m=0$ (即圆柱形梯度折射率纤维)时,这些公式就简化为已知的形式。文中还讨论了锥形梯度折射率纤维的孔径,同时给出了它的成象相片。

一、引 言

圆柱形梯度折射率纤维的光线轨迹和光学特性已有不少报道^[1-3],它和普通球面透镜相类似,同时具有焦点、焦距、主平面和物象关系式。但是有关锥形梯度折射率纤维的光学特性和成象理论却报道不多,本文试图做这方面的工作。当圆柱形梯度纤维棒拉制成锥形后,原先折射率为常数的圆柱面就变成了和轴同心的圆锥面。所以其折射率分布不仅和径向位置有关,同时也和轴向位置有关,这样,问题就显得较为复杂。

Brown 用变量替换方法求得了锥形梯度折射率纤维(图1)的轨迹方程^[4],在近轴近似下即为

$$x = x_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{\left(L_0 \rho_0 + \frac{m x_0}{2} \right)}{m b} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right), \quad (1)$$

$$L = L_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) - \frac{1}{b \rho_0} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2} L_0 \rho_0 + \frac{\tilde{A}^2 x_0}{m} \right) \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right), \quad (2)$$

式中 x_0 和 L_0 分别为光线的初始位置和斜率; ρ_0 和 ρ 分别为锥形大端和小端的半径; $b = \left[\left(\frac{\tilde{A}}{m} \right)^2 - \frac{1}{4} \right]^{\frac{1}{2}}$; $\tilde{A} = A\rho$; $\rho = \rho_0 - mZ$; $|\tilde{A}| > \frac{|m|}{2} = \frac{|\tan \alpha|}{2}$; α 为锥形纤维的半锥角。

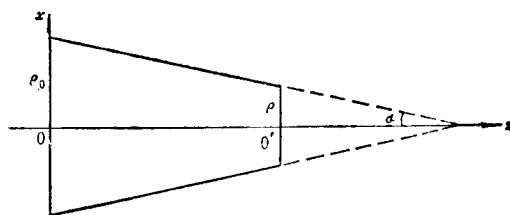


图1 锥形梯度纤维的坐标位置

二、锥形梯度折射率纤维的物象关系

锥形梯度折射率纤维的成像原理如图 2 所示. OM 为目标物, $O'M'$ 为像. 设 OM 位于纤维入射端前的 S_0 处, 其高为 x_0 . 为了方便, 目标另端 O 令其在纤维轴上. 我们现在考虑光线的传播, 沿轴入射的光线进入纤维后方向仍不变, 一直沿轴传播至出射. a 光

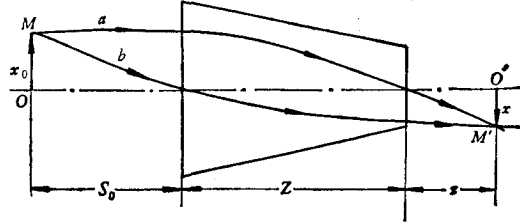


图 2 锥形梯度纤维的成像原理

线是平行于纤维轴入射, 其入射位置为 x_0 , 斜率为 0; b 光线和轴成一定角度入射, 其入射位置为 O , 斜率为 $(-x_0/S_0)$, 而进入纤维后为 $(-x_0/n_0 S_0)$. 如果求得 a, b 光线出射处的位移和斜率, 则就能得到 a, b 光线出射后的直线方程, 然后求出交点, 这样就能确定像的位置和大小. a 光线的轨迹为

$$x = x_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{x_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}}}{2b} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right),$$

$$\frac{\partial x}{\partial Z} = \frac{1}{-b\rho_0} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\tilde{A}^2 x_0}{m} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right).$$

这样光线出射后的直线方程为

$$\begin{aligned} & \frac{n_0 \tilde{A}^2 x_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}}{mb\rho_0} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) z + x \\ &= \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} x_0 \left[\cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{\sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right)}{2b} \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

b 光线的轨迹方程为

$$x = -\frac{x_0 \rho_0}{S_0 b m n_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right),$$

$$\frac{\partial x}{\partial Z} = -\frac{x_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}}{S_0 n_0} \cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{x_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}}{2b S_0 n_0} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right).$$

这样光线出射后的直线方程为

$$\begin{aligned} & \frac{x_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}}{S_0} \left[\frac{\sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right)}{2b} - \cos \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) \right] z - x \\ &= \frac{x_0 \rho_0}{b m S_0 n_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

联立方程(3)和(4), 归纳整理可解得

$$z = \frac{bm\rho}{n_0\tilde{A}^2} \left\{ \frac{\frac{n_0S_0\tilde{A}^2}{bm\rho_0} \cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \left[\frac{n_0S_0\tilde{A}^2}{bm\rho_0} \cdot \frac{1}{2b} + \frac{\tilde{A}^2}{b^2m^2}\right] \sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)}{\left[\frac{n_0S_0\tilde{A}^2}{bm\rho_0} + \frac{1}{2b}\right] \cdot \sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)} \right\}, \quad (5)$$

$$x = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}} x_0 \frac{(-1)}{\left[\frac{n_0S_0\tilde{A}^2}{bm\rho_0} + \frac{1}{2b}\right] \cdot \sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)}. \quad (6)$$

此处 z 为以端面为基准的像距; x 为像高。故图像的线放大率为

$$M = \frac{x}{x_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(-1)}{\left[\frac{n_0S_0\tilde{A}^2}{bm\rho_0} + \frac{1}{2b}\right] \sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)}. \quad (7)$$

在物像公式中所用的正负号和普通透镜系统相同, 当 $z > 0$ 时为实像, $z < 0$ 为虚像, $M > 0$ 为正立像, $M < 0$ 为倒立像, $|m| > 1$ 为放大像, $|m| < 1$ 为缩小像。

三、焦点和主平面

有了物像关系式, 就能讨论各种情况下的成像情况和焦点主平面的位置。

1. 如果成像在端面上, 即 $z = 0$ 时, 则此时的物距 S 就为

$$S = -\left(\frac{\rho_0}{bm n_0} + \frac{1}{2b}\right) \operatorname{tg}\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right). \quad (8)$$

这就是以端面为基准的在小端面上成像时的物距。

2. 如果成像在无限远处, 这时的物距就是焦点位置(端面基准), 物体就在焦点上。在方程(5)中令分母为 0, 即 $z \rightarrow \infty$, 故得大端焦点位置为

$$S_{\text{大焦}} = \frac{mb\rho_0}{n_0\tilde{A}^2} \left[\operatorname{ctg}\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \frac{1}{2b} \right]. \quad (9)$$

当平行光入射时, 像点的位置即焦点的位置, 在方程(5)中, 令 $S \rightarrow \infty$, 即得小端焦点位置为

$$S_{\text{小焦}} = \frac{mb\rho}{n_0\tilde{A}^2} \left[\operatorname{ctg}\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \frac{1}{2b} \right]. \quad (10)$$

3. 如果成像在线放大率 $M = 1$ 的位置上, 此时的物距位置即是主平面的位置(以端面为基准)。在方程(7)中, 令 $M = 1$, 故得大端主平面的位置为

$$h_{\text{大主}} = -\frac{bm\rho_0}{n_0\tilde{A}^2} \left[\frac{1}{2b} - \frac{\cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}}}{\sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)} \right]. \quad (11)$$

利用对称条件, 显然小端主平面的位置就为

$$h_{\text{小主}} = -\frac{bm\rho}{n_0\tilde{A}^2} \left[\frac{1}{2b} - \frac{\cos\left(b \ln \frac{\rho}{\rho_0}\right) - \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}}{\sin\left(b \ln \frac{\rho}{\rho_0}\right)} \right]$$

$$= -\frac{bm\rho}{n_0\tilde{A}^2} \left[\frac{1}{2b} + \frac{\cos\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}}{\sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)} \right]. \quad (12)$$

通常焦距的表达式是以主平面为基准的,所以由上述公式得

$$F_{\text{大焦}} = S_{\text{大焦}} - h_{\text{大主}} = \frac{mb\rho_0}{n_0\tilde{A}^2} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)}. \quad (13)$$

$$F_{\text{小焦}} = S_{\text{小焦}} - h_{\text{小主}} = \frac{mb\rho_0}{n_0\tilde{A}^2} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sin\left(b \ln \frac{\rho_0}{\rho}\right)}. \quad (14)$$

如果把物距 S 和像距 z 都化成以主平面为基准的公式 S' 和 z' , 这样就有熟知的成像公式

$$\frac{1}{z'} - \frac{1}{S'} = \frac{1}{F}. \quad (15)$$

在上述这些公式中, 令 $m = 0$, 即锥度为 0 的情况下, 也就是柱面梯度折射率纤维时, 即有 $(\rho_0/\rho) = 1$, $\lim_{m \rightarrow 0} bm = \tilde{A}$, $\tilde{A} = \rho_0 A$. 那么上述的一些公式就为

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{n_0 A} \left(n_0 S_0 A \cos AZ + \sin AZ \right), \\ X &= X_0 \frac{(-1)}{n_0 S_0 A \sin AZ - \cos AZ}, \\ M &= \frac{(-1)}{n_0 S_0 A \sin AZ - \cos AZ}, \\ S_{\text{焦}} &= \frac{1}{n_0 A} \operatorname{ctg} AZ, \\ h_{\text{主}} &= \frac{(\cos AZ - 1)}{n_0 A \sin AZ} = -\frac{1}{n_0 A} \operatorname{tg} \frac{AZ}{2}, \\ F &= \frac{1}{n_0 A \cdot \sin AZ}. \end{aligned}$$

显然这些公式和在柱面梯度折射率纤维所得到的是完全一致的。

四、锥形梯度折射率纤维的孔径

锥形梯度折射率纤维的孔径角可以用图 3 来说明。 AC 是光线行进的路程, $\angle BAO$ 是端面的折射角。为了简化讨论, 我们用一个同心在锥角顶 O 处半径为 OC 的圆来讨论。只要光线轨迹的切线 AB 和圆相交, 这种光线就能传播, 而极限情况就是和圆相切, 则此时所对应的就是大端最大的折射角 θ_M 和小端最大的折射角 θ'_M 。设纤维两端处于同一媒质空气中, 用简单的三角关系可以求得

$$\rho_0 \sin \phi_M = \rho \sin \phi'_M \quad (16)$$

和

$$\rho_0 \sin \phi_M = \left(\frac{2\rho\rho_0}{\rho + \rho_0} \right) \sqrt{2n_0\Delta n}, \quad (17)$$

式中 $\sqrt{2n_0\Delta n}$ 是柱形梯度折射率纤维的数值孔径。

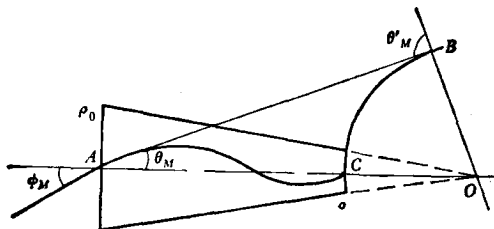


图3 锥形梯度纤维的孔径

(16)和(17)式表明,大端的孔径角小于小端的孔径角,它们的比例也就是纤维两端的直径之比,并且和柱形纤维有一定的关系,我们对锥形的梯度折射率纤维及和大端直径相同的柱形梯度纤维进行了孔径的测量,其具体测量结果和计算值如表1所示,两者符合得较好。图4是用这两种纤维所拍摄的相片,显然从相片上看到的景物视场范围大小也证明了上述公式的正确性。

表1 锥形和柱形梯度纤维孔径角的比较

纤维端面直径 (mm)	测出的孔径角(2θ)	根据测量值计算结果
大端 0.98	$23^\circ 50'$	$d_1 \sin \theta_1 = 0.202$
小端 0.47	$52^\circ 30'$	$d_2 \sin \theta_2 = 0.208$
柱形 0.95	$38^\circ 48'$	$\frac{2d_1 d_2}{d_1 + d_2} \sin \theta = 0.209$



(a) 小端(ϕ 为 0.47mm)面对目标 (b) 大端(ϕ 为 0.98mm)面对目标 (c) 柱形(ϕ 为 0.95mm)

图4 用锥形聚焦纤维拍摄的相片(在物距相等的情况下)可比较孔径的大小

李金科、王晓多、霍军民同志为我们提供聚焦纤维材料,董新意、霍秀婷同志协助拍摄成象相片,一并表示感谢。

参 考 文 献

- [1] F. P. Kapron, *Journal of the Optical Society of America*, **60** (1970), 1433.
- [2] 殷宗敏, 物理, **10** (1981), 65.
- [3] 殷宗敏, 祝颂来, 陈尧生, 物理, **9** (1980), 549.
- [4] S. J. S. Brown, *Appl. Opt.*, **19** (1980), 1056.

IMAGE PROPERTIES OF TAPERED GRADIENT-INDEX FIBER

YIN ZONG-MIN ZHU SONG-LAI

(Xian Institute of Optics and Precision Mechanics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Starting from the ray path equation, object-image relationships are found and used to determine the equivalent focal length and the principal planes of tapered GRIN fiber. These equation reduce to the known formulas when $m=0$ (that is, for a cylindrical GRIN fiber). The aperture of tapered GRIN fiber is discussed in this paper and the photographs of the image are also included.

在白光图象处理系统中利用 色度测量作黑白图象的加法和减法

母国光¹⁾ 蒋建国²⁾ 刘华光³⁾

1981 年 3 月 30 日收到

提 要

本文提供了一个新技术的理论和实验结果,即在白光图象处理系统中利用傅里叶频谱平面的彩色滤波和在输出平面的色度测量来作黑白透明图象的加法和减法。待处理的透明片的光强透过率可用原色的色度坐标来表示,两个图象的相加和相减的结果可在同一输出平面上以其相应的色度坐标值表示出来。

一、引 言

众所周知,光学图象处理的一个重要应用是作光学图象的相加和相减。约在 15 年前, Gabor 等人^[1]首先提出用复振幅的加法和减法作光学图象的综合,他们所用的方法是在一张全息底片上连续记录两个或更多个复衍射图样,然后再现此合成全息的图象。稍后有 Bromley 等人^[2]提出用全息傅里叶减法作实时的图象相减。继而有 Lee 等人^[3]报告了他们用衍射光栅作图象相加和相减的结果。

Ebersole^[4]对截止到 1975 年的已发表的有关光学图象加法和减法的主要文章作了一个很好的归纳和分类。他认为作图象的相加和相减的技术可分为全息法、非全息干涉法、编码法和正负片叠加法等四种。

此外,最近有 Yu 和 Tai^[5,6]建议用非相干光或白光图象技术作图象的相加或相减,但是到现在为止还没见到有关实验结果的报道。

本文旨在提供一个利用白光图象处理系统作黑白图象的相加和相减的方法,即借助于在白光图象处理系统中傅里叶频谱平面的彩色滤波和在其输出平面上的色度测量来实现黑白透明图象的相加和相减。与全息法相比较,它有不用相干光源和消除噪声的显著优点,操作亦相当简单;它是 Ebersole 所述四种方法之外的采用色度学原理的一种新技术。我们所提出的这个技术包括三个主要步骤:(1)将待处理的三个(或两个)透明图象编码在一张黑白感光底片上,并作成透明正片;(2)在白光图象处理系统的傅里叶频谱

1) 母国光 南开大学物理系,美国阿拉巴马大学的访问教授。

2) 蒋建国 3) 刘华光的通信地址: Department of Electrical Engineering, University of Alabama, University, Alabama 35486.

平面上用原色滤色片 (primary color filter) 作彩色滤波^[14]; (3) 在系统的输出平面上, 测量所得彩色图象的色度坐标, 并利用本文导出的待处理的黑白图象的光强透过率与在系统输出平面上所得彩色图象的色度坐标的关系式, 来计算所求的结果。

倘若对输入方式作适当的改变, 用本文所提供的原理还可以很容易地作图象相加和相减的实时处理。

二、原 理

首先, 我们来考虑加法。假定有三个透明图象相加, 那么, 就可以按作者已经报道过的编码方法^[7,8], 将待处理的三张透明图象编码^[9]在一张伽玛值为 γ_1 的负片上, 再将此编码的负片用伽玛值为 γ_2 的感光板翻成正片。于是, 在所得正片上光强透过率可如下式表示:

$$T_p(x, y) = K\{k_1 T_{01}(x, y)[1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x)] + k_2 T_{02}(x, y) \times [1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x')] + k_3 T_{03}(x, y)[1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x'')]\}^{-\gamma_1 \gamma_2}, \quad (1)$$

其中 K 是比例常数; k_1 , k_2 和 k_3 是与编码过程中的曝光量和显影过程有关的比例常数; $T_{01}(x, y)$, $T_{02}(x, y)$ 和 $T_{03}(x, y)$ 代表被处理的原透明片上的光强透过率; (x, y) 是定义在第一张感光负片上的坐标; x' 和 x'' 是编码用的 Ronchi 栅在第二和第三次曝光时的采样轴^[9]。此外, 还有

$$\operatorname{sgn}(\cos p_0 x) \triangleq \begin{cases} 1 & \cos(p_0 x) \geq 0; \\ -1 & \cos(p_0 x) \leq 0, \end{cases} \quad (2)$$

其中 p_0 是 Ronchi 栅的采样频率。

若能使(1)式中的 $-\gamma_1 \gamma_2 = 2$, 则所得显影后的透明正片上的振幅透过率为

$$t_p(x, y) = K'\{k_1 T_{01}(x, y)[1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x)] + k_2 T_{02}(x, y) \times [1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x')] + k_3 T_{03}(x, y)[1 + \operatorname{sgn}(\cos p_0 x'')]\}, \quad (3)$$

其中 $K' = \sqrt{K}$, 是一个比例常数。

在完成上述编码后, 将所得编码透明正片 $t_p(x, y)$ 放置在一个白光图象处理系统的输入平面内, 于是在第一傅里叶变换透镜的后焦平面上得到呈彩虹的傅里叶频谱。我们利用红、绿、蓝 (RGB) 三个原色滤色片分别对相应于 $T_{01}(x, y)$, $T_{02}(x, y)$ 和 $T_{03}(x, y)$ 的一个一级谱项 (例如正一级) 作彩色滤波, 而遮住零级谱项及其他各级谱项, 于是在白光系统的输出平面上获得一个假彩色图象, 其光强分布可写成

$$I_c(x, y) = k_1 T_{01}^2(x, y)(R) + k_2 T_{02}^2(x, y)(G) + k_3 T_{03}^2(x, y)(B) \quad (4)$$

或者

$$I_c(x, y) = R(R) + G(G) + B(B), \quad (5)$$

其中

$$R = k_1 T_{01}^2(x, y), \quad G = k_2 T_{02}^2(x, y), \quad B = k_3 T_{03}^2(x, y). \quad (6)$$

按色度学的语言^[10], (R) , (G) 和 (B) 代表沿三个原色轴的单位矢量。(5) 式表示多色强度 $I_c(x, y)$ 是 R 个单位的 (R) , G 个单位的 (G) 和 B 个单位的 (B) 的矢量和。于是输出平面上假彩色图象上任一点的彩色都可以用色度空间的点坐标来表示。

进一步,我们还可以引入一组规范化色度坐标

$$\left. \begin{aligned} r &= R/(R+G+B) \\ g &= G/(R+G+B) \\ b &= B/(R+G+B) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

因为 $r+g+b=1$, 所以任一彩色都可以简化用 (r, g) 表示。例如,图 1 所示即为用 700nm 为红光, 546.1nm 为绿光和 435.8nm 为蓝光, 并以等能量白为参考白时对所有光谱色作出的色度图^[10]。

显然,如果彩色图象上某点的色度坐标用色度计^[11]测量出来的结果为 (r_0, g_0) , 那么,利用(6),(7)式和 $r+g+b=1$ 的关系式就可以计算出: $k_1 T_{01}^2(x, y)$, $k_2 T_{02}^2(x, y)$ 和 $k_3 T_{03}^2(x, y)$ 。而如果我们还知道比例常数 k_1, k_2 和 k_3 , 则我们就可以确定出 $T_{01}(x, y)$, $T_{02}(x, y)$ 和 $T_{03}(x, y)$ 之值。

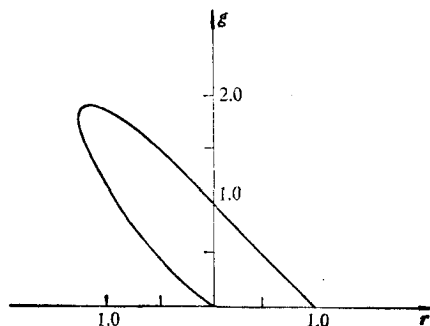


图 1

实际上,我们最有兴趣的是想知道两个稍有不同图象的差别,这正是为什么说图象相减是重要的。为检测两图象的差别(即图象相减)就要先将被检测的两个图象编码成透明正片,然后在白光图象处理系统的傅里叶频谱平面以任意两原色滤色片分别对 $T_{01}(x, y)$ 和 $T_{02}(x, y)$ 的一个一级谱项进行滤波,同时遮住所有其余谱项。若所用的原色滤色片是红的和绿的,则在系统输出平面上的假彩色图象上一点的色度坐标与待处理图象的光强透过率的关系可由(5)式和(7)式得

$$I_c(x, y) = R(R) + G(G) \quad (8)$$

和

$$\left. \begin{aligned} r &= R/(R+G) \\ g &= G/(R+G) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

显然,由此色度坐标值 (r, g) 可计算出待检测两图象的光强透过率的比值。若两象中之一为已知,则另一象的光强透过率分布是可以算出来的。例如,我们用色度计在假彩色图象上的 (x_0, y_0) 点量得 $r = 0.5$, $g = 0.5$, 从(9)式得

$$G = R$$

或

$$k_1 T_{01}^2(x_0, y_0) = k_2 T_{02}^2(x_0, y_0),$$

即

$$T_{01}^2(x_0, y_0)/T_{02}^2(x_0, y_0) = k_2/k_1.$$

换言之, $r = 0.5$, $g = 0.5$ 的黄斑意味着被处理的两透明图象在 (x_0, y_0) 处是由光强透过率相等的两象相加而成的。具有各种不同光强透过率的两图象的相加将表现为具有由所用两原色的中间各色构成的假彩色图象。反之,作假彩色象的色度坐标可确定进行相加的两图象的光强透过率的比例。

在系统输出平面的假彩色图象的某一点 (x_0, y_0) 或某一区域上,如果只出现一种原

色的彩色(如只呈原色的红色,或只呈原色的绿色),这就表示,在该点或区只有 $T_{01}(x_0, y_0)$ 或只有 $T_{02}(x_0, y_0)$, 两者之差不是 $T_{01}(x_0, y_0)$ 就是 $T_{02}(x_0, y_0)$. 例如,若用色度计测得 (x_0, y_0) 点的 $r_0 = 1.0$, $g_0 = 0$. 则由(6)和(9)式得 $T_{02}(x_0, y_0) = 0$. 显然呈红色的部分图象 $T_{01}(x_0, y_0)$ 就是被检测的两图象在 (x_0, y_0) 处的差别. 在这个意义上,我们就完成了两个原来是黑白图象的相减,识出了差别,并且在同一输出平面上能识别 $T_{01} - T_{02}$, 也能识别 $T_{02} - T_{01}$, 还能表示出 $T_{01} + T_{02}$. 这是本文所提供的方法的优点.

三、实验演示

我们先将如图 2(a) 和 (b) 所示的两个图象按前述方法编码在 $r_1 = 0.85$ 的 Kodak 4147 黑白感光板上^[12], 随后用 Kodak 4155 ($r_2 = -2.2$) 黑白感光板翻成透明正片.

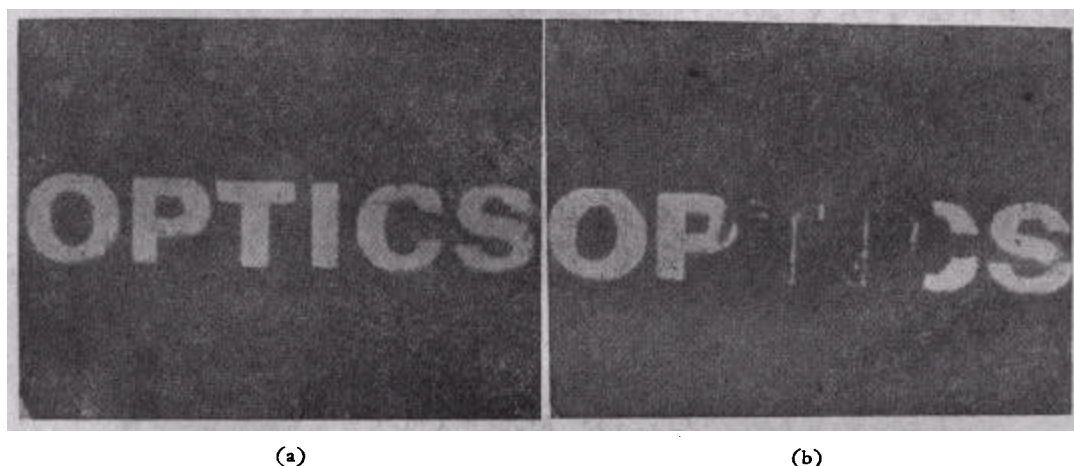


图 2 待检测的两黑白图象

用 Kodak # 29 原色红滤色片^[13]和 Kodak # 61 原色绿滤色片来分别滤 $T_{01}(x, y)$ 和 $T_{02}(x, y)$ 的在傅里叶平面上的 +1 级谱, 于是, 在白光图象处理系统的输出平面上可分别得到如图 3(a) 和 (b) 所示的红绿两张图象. 当令红绿同时成象时, 则合成得到如图 4

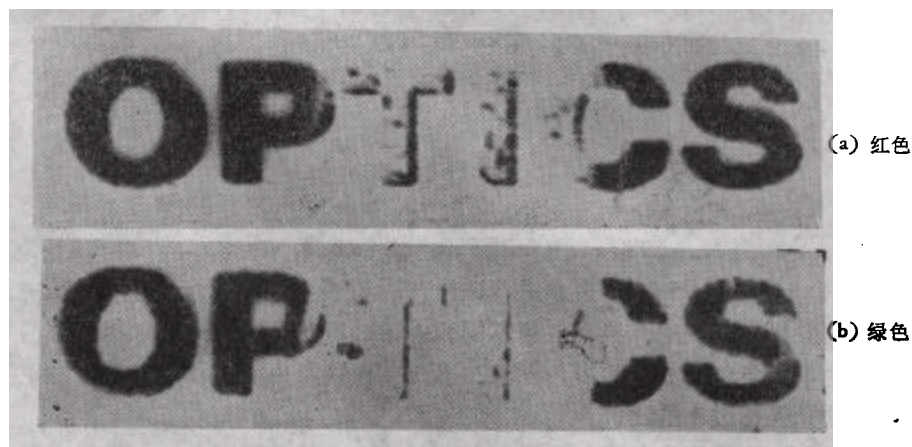


图 3 在输出平面上可相继得到的待测两图象的假彩色象

所示的假彩色图象,它既含有两象的相加的结果,也有两象相减的结果。

图4中“OPTICS”的黄色部分是两图象相加的结果,其中呈红色的“TI”和部分“C”是相减的结果,即在 $T_{02}(x, y)$ 中没有“TI”和部分“C”。我们还看到在图4中有一个绿色三角,它是 $T_{01}(x, y)$ 中所没有的。这是 $T_{02}(x, y)$ 比 $T_{01}(x, y)$ 多的部分。

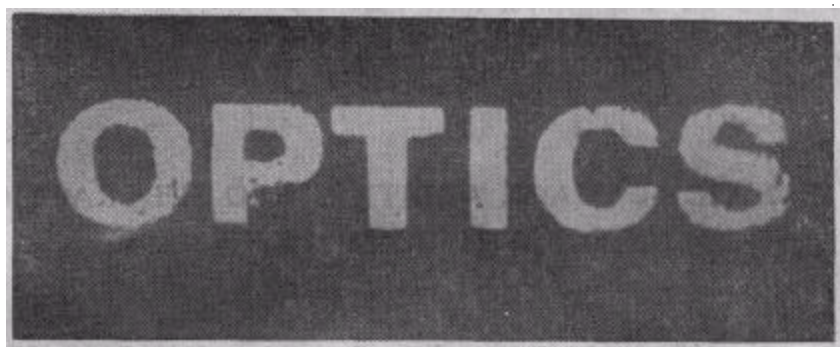


图 4

虽然在编码和滤色过程中操作还不很严格,但是所得结果却充分地表现了所述方法的高灵敏程度。它在监视、检测和遥感图识别方面具有很高的实用价值。

四、结 束 语

本文提供了在白光图象处理系统中利用傅里叶频谱平面的彩色滤波和在输出平面的色度测量来作黑白图象的加法和减法的原理和实验结果。由输出平面内假彩色图象的色度坐标来确定待处理的两或三个图象的相对光强透过率;用假彩色图象的原色部分来显示两图象的差别。

本方法的特点还在于它能一次获得相加和相减的全部信息。

如果以两束物光输入两张图象来代替编码透明正片的输入方式,则本文所述图象相加和相减即可实时化,有关这方面的结果将另文报道。

与已发表的其他图象加法和减法相比较^[4],它具有简单、经济和灵活多用的优点;与用灰度级作差别显术的其他方法相比较,本文所提方法有利用彩色的特点,它有较高的灵敏度;与全息法相比较,由于本文所提方法不用相干光源,因而具有成本低和消除噪声的好处。

这项研究得到美国阿拉巴马大学工学院,公共卫生学院及校长办公室的联合资助。作者在此表示谢意。

参 考 文 献

- [1] D. Gabor, G. W. Stoke, R. Restriek, A. Funkhouser and D. Brumm, *Phys. Lett.*, 18(1965), 116.
- [2] K. Bromley, M. A. Monahan, J. F. Bryant and J. Thompson, *Appl. Phys. Lett.*, 14(1969), 67.
- [3] S. H. Lee, S. K. Yao and A. G. Milnes, *J. Opt. Soc. Amer.*, 60(1970), 1037.
- [4] J. F. Ebersole, *Opt. Engr.*, 14(1975), 436.
- [5] F. T. S. Yu, *Opt. Comm.*, 27(1978), 23.
- [6] F. T. S. Yu and Anthony Tai, *Appl. Opt.*, 18(1979), 2705.

- [7] F. T. S. Yu, G. G. Mu and S. L. Zhuang, *Optik*, (in press).
- [8] G. G. Mu, C. K. Chiang and H. K. Liu, (*Opt. Lett.*, June 1981).
- [9] A. Macovski, *Appl. Opt.*, **11**(1972), 416.
- [10] W. T. Wintringham, *Proc. of I. B. E.*, **39**(1951), 1135.
- [11] "Report of the Committee on Colorimetry of optical Society of America" Ch. VIII "Colorimeters and Color Standards" *J. Opt. Soc. Amer.*, **35**(1945), 1.
- [12] Kodak professional Black-and-White films, Kodak published No. F5, (1979).
- [13] Kodak filters for Scientific and Technical Uses, Kodak Publication No. B-3, (1980).
- [14] Francis, T. S. Yu, 母国光, 庄松林, *物理学报*, **30**(1981), 841.

WHITE-LIGHT IMAGE ADDITION AND SUBTRACTION BY COLORIMETRIC MEASUREMENT

G. G. MU* C. K. CHIANG H. K. LIU

(*Department of Electrical Engineering, University of Alabama, University, AL 35486*)

ABSTRACT

Theory and experiment of a new white-light image processing technique for black-and-white image addition and "subtraction" by means of Fourier plane spatial color filtering are described. The intensity transmittances of three (or two) processed images can be expressed in a chromaticity coordinate system of primary colors and so are the results of the addition and/or "subtraction" of the two images.

* Visiting Professor from Nankai University, Department of Physics Tianjin, Peoples Republic of China.

微裂纹演化的随机模型

邢 修 三

(中国科学院原子能研究所)

1980年12月24日收到

提 要

本文用非平衡统计的概念和方法探讨了各种断裂过程中的共同问题——微裂纹或微空洞的演化。文中从描述微裂纹演化过程的多元主方程出发,导出了微裂纹演化动力学方程,指出了微观机理与宏观过程相结合的途径,讨论了微裂纹分布函数应有的性质。

一、引 言

固体在外应力作用下,随着载荷方式和温度条件的不同,可有几种不同类型的断裂。当外应力是定向的(如拉伸或压缩),在低温或室温,多数金属和离子晶体及共价晶体发生脆性断裂;在滑移充分的室温或高温,变为范性断裂;在扩散充分的更高温度且当外应力较小时,呈现蠕变断裂;若外应力非定向的,而是交变的,金属发生疲劳断裂。

不同类型的断裂,其微观机理不同。脆性断裂^[1]是由滑移位错产生的微裂纹长大和传播引起的;范性断裂^[2]是由范性变形产生的微空洞长大和相互合并长大引起的;蠕变断裂^[3,4]是蠕变过程中成核的微空洞或微裂纹扩散长大和相互合并长大引起的;至于疲劳断裂^[5],仍是微裂纹不断扩展引起的。

尽管类型和微观机理不同,各种断裂之间仍有共同特点。这就是:固体的各种断裂都有一个长短不等的发展过程,从宏观外形来说,固体在不断发生范性变形(即使脆性断裂也有极小的范性变形),从微观结构来说,若非预先存在一个大裂纹,固体内部总有大量不同大小的微裂纹或微空洞在不断演化(这里所谓演化,即是成核、长大和相互合并三部分的总称)。这些宏观和微观变化,都是不可逆的。正因此,可以认为,所有断裂过程都是不可逆的动力学过程,而微裂纹或微空洞的成核、长大和相互合并,最后由一个主裂纹导致断裂,却是各种断裂过程的实质和共同规律。

作者^[6]在研究脆性断裂时,曾试图把微观机理和宏观过程结合起来,从理论上将整个断裂过程描述成微裂纹系统成核长大的非平衡统计过程和最可几的单个主裂纹的传播过程,从而导出所有重要的宏观力学量。本文正是在此基础上,进一步把各种断裂过程中的共同问题——微裂纹或微空洞系统的演化都看成是个非平衡统计过程,并用随机过程的理论方法来研究。这样做的目的:一是想用统一的概念和方法来研究固体的各种断裂,二是用更严格的数学方法来描述微裂纹或微空洞的演化过程。

为精简用词,下面一概将微裂纹或微空洞都称之为微裂纹,所有讨论,对两者同样适用,无必要时,不再区别指出.

二、多元主方程

如上所述,在外应力作用下,微裂纹系统在不断演化.由于实际固体内部微观成分、缺陷及显微组织的不均匀性,各个微裂纹的成核条件、长大速率及其与其他微裂纹的相互合并几率,都将随机变化.正因此,我们才将微裂纹系统的演化过程看成是个非平衡统计过程.现在就来导出描述这种演化过程的主方程.为简化起见,我们只讨论形状相同的一维长度的微裂纹,并简设它们在固体内部的空间取向分布是均匀的.设 t 表示固体受外应力作用的时间,动力学变量 c 表示微裂纹长度(或微空洞半径).密度分布函数 $N_c dc \equiv N(t, c)dc$ 表示 t 时单位体积内在长度 c 和 $c + dc$ 间形成的微裂纹的数目.多元几率 $P(\{N_c\}, t)\{\delta N_c\} \equiv P(N_{c_1}, N_{c_2}, \dots, N_{c_i}, \dots, t)\delta N_{c_1}\delta N_{c_2}\dots\delta N_{c_i}\dots$ 表示 t 时形成一组长度为 $(c_1, c_2, \dots, c_i, \dots)$ 而密度各在 N_{c_1} 和 $N_{c_1} + \delta N_{c_1}$ 间、 N_{c_2} 和 $N_{c_2} + \delta N_{c_2}$ 间... N_{c_i} 和 $N_{c_i} + \delta N_{c_i}$ 间...的微裂纹的几率. $W(\{N_c\} \rightarrow \{N'_c\})$ 表示单位时间内一组密度为 $\{N_c\}$ 的微裂纹演化为另一组密度为 $\{N'_c\}$ 的微裂纹的几率.由于微裂纹的成核长大和合并仅与当时及稍早的外应力和固体的微观结构有关,而与其更早的历史条件无关,故微裂纹系统的演化过程可看成是个马尔柯夫过程,根据几率平衡原理,描述这个过程的多元主方程应为

$$\frac{\partial P(\{N_c\}, t)}{\partial t} = \int [W(\{N'_c\} \rightarrow \{N_c\})P(\{N'_c\}, t) - W(\{N_c\} \rightarrow \{N'_c\})P(\{N_c\}, t)]\{\delta N_c\}. \quad (1)$$

为了使(1)式具体化,就需进一步结合微裂纹系统演化包含着成核长大和合并三部分的具体内容来讨论.考虑到数学上处理的相似性,我们将成核长大作为一部分来讨论,而将合并作为另一部分来讨论,即多元主方程在形式上可分为两部分

$$\frac{\partial P(\{N_c\}, t)}{\partial t} = \frac{\partial^{ns} P(\{N_c\}, t)}{\partial t} + \frac{\partial^k P(\{N_c\}, t)}{\partial t}. \quad (2)$$

(2)式右边第一项为成核长大项,第二项为合并项.

现在来求这二者的具体表示.设 $q_{c_i} dc_i \equiv q(t, c_i)dc_i$ 为 t 时单位时间单位体积内微裂纹在长度 c_i 和 $c_i + dc_i$ 间成核的数目, $\dot{c}_i \equiv \dot{c}(t, c_i)$ 为 t 时长度为 c_i 的微裂纹的长大速率, Δc_i 为变化 dc_i 时由于随机性而使微裂纹 c_i 所作的实际变化, $\pm \frac{1}{\Delta c_i} (\dot{c}N)_{c_i}$ 为单位时间单位体积内由于长大而经 c_i 端在单位长度内长入或长出的微裂纹数目,则微裂纹成核长大而引起多元几率的变化率为

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{ns} P(\{N_c\}, t)\{\delta N_c\}}{\partial t} = & \int d\mathbf{i} \{ [qP(\{N_c\}, t)]_{(N-\delta N)_{c_i}} - [qP(\{N_c\}, t)]_{N_{c_i}} \} \{\delta N_c\}_A \\ & + \int \frac{d\mathbf{i}}{\Delta c_i} \{ [\dot{c}NP(\{N_c\}, t)]_{(N-\delta N)_{c_i-\Delta c_i}} - [\dot{c}NP(\{N_c\}, t)]_{N_{c_i}} \} \{\delta N_c\}_A. \end{aligned} \quad (3)$$

上式右边第一部分是成核使微裂纹密度变化而引起的,第二部分是长大使微裂

纹密度变化而引起的, δN_c 是由于成核或长大而使长度为 c 的微裂纹的密度变化数, $\{\delta N_c\} = \delta N_c \{\delta N_c\}_A$. 注意: 在成核部分第一项的右下标用的是 $(N - \delta N)_{c_i}$ 符号, 而在长大部分第一项的右下标用的却是 $(N - \delta N)_{c_i - \Delta c_i}$ 符号, 因长大是由小的微裂纹 $c_i - \Delta c_i$ 变成 c_i 的, 而成核则是看成在 c_i 处产生的.

在研究微裂纹的相互合并时, 鉴于固体内部微裂纹的密度通常都较稀薄, 因而只考虑两个微裂纹间的相互合并, 略去三个以上的相互合并项. 设 $\omega(c_i, c_j, c)$ 为微裂纹 c_i 和 c_j 在单位时间内合并成微裂纹 c 的几率, 则由于合并使微裂纹密度变化而引起多元几率的变化率为

$$\frac{\partial^k P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}}{\partial t} = \int di \int dj [\omega(c_i, c_j, c) N'_{c_i} N'_{c_j} P(\{N'_c\}, N_{c_i} + \delta N_{c_i}, N_{c_j} + \delta N_{c_j}, N_c - \delta N_c, t) - \omega(c, c_j, c_i) N_c N_{c_j} P(\{N_c\}, t)] \{\delta N_c\}_A, \quad (4)$$

其中

$$\delta N_{c_i} + \delta N_{c_j} \rightarrow \delta N_c$$

表示 δN_{c_i} 个微裂纹与 δN_{c_j} 个微裂纹合并成 δN_c 个微裂纹.

将(3)与(4)式代入(2)式, 即得我们所求的具体描述微裂纹系统演化过程的多元主方程.

三、主方程展开式

为了导出微裂纹演化动力学方程, 先将组成多元主方程的(3)式和(4)式各自展开.

首先, 我们引入阶梯算符 $\exp\left(\pm \delta N_c \frac{\partial}{\partial N_c}\right)$, 它满足

$$\exp\left(\pm \delta N_c \frac{\partial}{\partial N_c}\right) \phi(N_c) = \phi(N_c \pm \delta N_c). \quad (5a)$$

$$\exp\left[e^{\pm \Delta c \frac{\partial}{\partial c}} \left(\pm \delta N_c \frac{\partial}{\partial N_c}\right)\right] \phi(N_c) = \phi((N \pm \delta N)_{c \pm \Delta c}), \quad (5b)$$

其中 $\phi(N_c)$ 为 N_c 的任意函数.

1. 成核长大项的展开

利用 (5a), (5b) 式, (3) 式为

$$\begin{aligned} \frac{\partial^k P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}}{\partial t} &= \int di \left[\exp\left(-\delta N_{c_i} \frac{\partial}{\partial N_{c_i}}\right) - 1 \right] q_{c_i} P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\ &+ \int \frac{di}{\Delta c_i} \left\{ \exp\left[e^{-\Delta c_i \frac{\partial}{\partial c_i}} \left(-\delta N_{c_i} \frac{\partial}{\partial N_{c_i}}\right)\right] - 1 \right\} (c_i N_{c_i}) P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\ &= \int di \left\{ \exp\left[-\int dk \delta(k-i) \delta N_{c_k} \frac{\partial}{\partial N_{c_k}}\right] - 1 \right\} q_{c_i} P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\ &+ \int \frac{di}{\Delta c_i} \left\{ \exp\left[-\int dk \delta(k-i) \left(1 - \Delta c_k \frac{\partial}{\partial c_k}\right) \delta N_{c_k} \frac{\partial}{\partial N_{c_k}}\right] - 1 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (\dot{c}_i N_{c_i}) P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\
& = \int di \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n \delta(k_1 - i) \cdots \delta(k_n - i) \delta N_{c_{k_1}} \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \right. \\
& \quad \times \left. \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \right] q_{c_i} P(\{N_c\}, t) \delta N_c \{\delta N_c\}_A \\
& + \int di \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n \delta(k_1 - i) \cdots \delta(k_n - i) \left[\sum_{l=1}^n \left(-\frac{\partial}{\partial c_l} \right) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^n \left(-\frac{\partial}{\partial c_l} \right) \left(-\Delta c_m \frac{\partial}{\partial c_m} \right) \right] \delta N_{c_{k_1}} \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \right\} \\
& \times (\dot{c}_i N_{c_i}) P(\{N_c\}, t) \delta N_c \{\delta N_c\}_A. \tag{6}
\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^* P(\{N_c\}, t)}{\partial t} & = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n \delta N_{c_{k_1}} \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \\
& \quad \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \int di \delta(k_1 - i) \cdots \delta(k_n - i) \left\{ q_{c_i} + \left[\sum_{l=1}^n \left(-\frac{\partial}{\partial c_l} \right) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^n \left(-\frac{\partial}{\partial c_l} \right) \left(-\Delta c_m \frac{\partial}{\partial c_m} \right) \right] (\dot{c}_i N_{c_i}) \right\} P(\{N_c\}, t). \tag{7}
\end{aligned}$$

(6), (7) 式中的 $\delta(k - i)$ 为 Dirac 函数.

2. 合并项的展开

我们先注意: 当 c 与 c_i 互换位置, 下列两式成立.

$$\begin{aligned}
a) \quad & \int dc \int di \int dj \omega(c, c_j, c_i) N_c N_{c_j} P(\{N_c\}, t) \\
& = \int di \int dc \int dj \omega(c_i, c_j, c) N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t), \tag{8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b) \quad & \int di \int dj \int dk \omega(c_i, c_j, c) \delta(k - c) \delta N_{c_k} \frac{\delta}{\delta N_{c_k}} N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t) \\
& = \int dk \delta N_{c_k} \frac{\delta}{\delta N_{c_k}} \int di \int dj \omega(c, c_j, c_k) N_c N_{c_j} P(\{N_c\}, t). \tag{9}
\end{aligned}$$

将(4)式两边对 c 积分, 并利用(5)式和(8)式, 得

$$\begin{aligned}
\int dc \frac{\partial^* P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}}{\partial t} & = \int dc \int di \int dj [\omega(c_i, c_j, c) N'_{c_i} N'_{c_j} P(\{N_c\}, \\
& N_{c_i} + \delta N_{c_i}, N_{c_j} + \delta N_{c_j}, N_c - \delta N_c, t) - \omega(c, c_j, c_i) N_c N_{c_j} P(\{N_c\}, t)] \{\delta N_c\}_A \\
& = \int dc \int di \int dj \omega(c_i, c_j, c) \left[\exp \left(\delta N_{c_i} \frac{\delta}{\delta N_{c_i}} + \delta N_{c_j} \frac{\delta}{\delta N_{c_j}} - \delta N_c \frac{\delta}{\delta N_c} \right) - 1 \right] \\
& \quad \times N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\
& = \int dc \int di \int dj \omega(c_i, c_j, c) \left\{ \exp \left[\int dk (\delta(k - i) - \delta(k - c)) \delta N_{c_k} \frac{\delta}{\delta N_{c_k}} \right] - 1 \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t) \{\delta N_c\}_A \\
& = \int dc \int di \int dj \omega(c_i, c_j, c) \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n [\delta(k_1 - i) - \delta(k_1 - c)] \right. \\
& \quad \cdots [\delta(k_n - i) - \delta(k_n - c)] \delta N_{c_{k_1}} \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \\
& \quad \times \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \left. \right\} N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t) \delta N_c \{\delta N_c\}_A. \quad (10)
\end{aligned}$$

(10) 式两边去积分, 得

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^k P(\{N_c\}, t)}{\partial t} & = \int di \int dj \omega(c_i, c_j, c) \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n [\delta(k_1 - i) \right. \\
& \quad - \delta(k_1 - c)] \cdots [\delta(k_n - i) - \delta(k_n - c)] \delta N_{c_{k_1}} \\
& \quad \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \left. \right\} N_{c_i} N_{c_j} P(\{N_c\}, t). \quad (11)
\end{aligned}$$

将(7)式和(11)式代入(2)式, 则得多元主方程的展开式

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(\{N_c\}, t)}{\partial t} & = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dk_1 \cdots \int dk_n \delta N_{c_{k_1}} \cdots \delta N_{c_{k_{n-1}}} \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_1}}} \cdots \frac{\delta}{\delta N_{c_{k_n}}} \\
& \quad \times \left\{ di \delta(k_1 - i) \cdots \delta(k_n - i) (-1)^n \left[q_{c_i} + \left(- \sum_{l=1}^n \frac{\partial}{\partial c_l} \right. \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^n \Delta c_m \frac{\partial}{\partial c_l} \frac{\partial}{\partial c_m} \right) (\dot{c}_i N_{c_i}) \right] + \int di \int dj \omega(c_i, c_j, c) [\delta(k_1 - i) \\
& \quad - \delta(k_1 - c)] \cdots [\delta(k_n - i) - \delta(k_n - c)] N_{c_i} N_{c_j} \left. \right\} P(\{N_c\}, t). \quad (12)
\end{aligned}$$

设微裂纹演化的随机起伏可看成是最常用的高斯起伏, 则展开式只存在第一项和第二项, 其余各项都可略去. 利用(9)式, (11)式变为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(\{N_c\}, t)}{\partial t} & = - \int dk \frac{\delta}{\delta N_{c_k}} \left\{ q_{c_k} - \frac{\partial}{\partial c_k} (\dot{c}_k N_{c_k}) \right. \\
& \quad + \int dj [\omega(c_i, c_j, c_k) N_{c_i} N_{c_j} - \omega(c_k, c_j, c_i) N_{c_k} N_{c_j}] \left. \right\} P(\{N_c\}, t) \\
& \quad + \frac{1}{2} \int dk \int dl \delta N_{c_k} \frac{\delta}{\delta N_{c_k}} \frac{\delta}{\delta N_{c_l}} \left\{ \delta(k - l) \right. \\
& \quad \times \left[q_{c_k} + \left(- \frac{\partial}{\partial c_k} - \frac{\partial}{\partial c_l} + \Delta c_k \frac{\partial}{\partial c_k} \frac{\partial}{\partial c_l} \right) (\dot{c}_k N_{c_k}) \right] \\
& \quad + \int dj [\omega(c_i, c_j, c_k) N_{c_i} N_{c_j} + \omega(c_k, c_j, c_i) N_{c_k} N_{c_j}] \\
& \quad \times [\delta(k - l) - \delta(k - i)] \left. \right\} P(\{N_c\}, t). \quad (13)
\end{aligned}$$

这就是众所周知的 Fokker-Plank 型方程, 它是我们所得的微裂纹演化多元主方程展开式(12)的近似结果.

四、演化动力学方程

所谓微裂纹演化动力学方程,是指描述微裂纹系统演化过程的动力学变量 c 的密度分布函数 $N(t, c)$ 随时间变化的方程. 按随机过程理论的标准方法^[7,8],立即由(12)式或(13)式求得 $N(t, c)$ 应遵守下列随机微分积分方程,或名广义朗之万方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(t, c)}{\partial t} = & q(t, c) - \frac{\partial}{\partial c} [\dot{c}(t, c)N(t, c)] \\ & + \int dj [\omega(c_i, c_j, c)N(t, c_i)N(t, c_j) \\ & - \omega(c, c_j, c_i)N(t, c)N(t, c_j)] + F(N_c, t), \end{aligned} \quad (14)$$

其中起伏项满足

$$\langle F(N_c, t) \rangle = 0, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \langle F(N_{ck}, t)F(N_{cl}, t') \rangle = & \delta(t - t')\delta(k - l)\delta N_{ck} \left\{ q(t, c_k) \right. \\ & + \left(-\frac{\partial}{\partial c_k} - \frac{\partial}{\partial c_l} + \Delta c_k \frac{\partial}{\partial c_k} - \frac{\partial}{\partial c_l} \right) [\dot{c}(t, c_k)N(t, c_k)] \\ & + \int dj [\omega(c_i, c_j, c_k)N(t, c_i)N(t, c_j) + \omega(c_k, c_j, c_i)N(t, c_k)N(t, c_j)] \\ & \left. \times [\delta(k - l) - \delta(k - i)] \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

(15)式和(16)式正表示随机起伏项是高斯分布的,其平均值为零,而其相关函数是 δ 函数型的.

(14)式的物理意义为:微裂纹数目随时间的变化率来自三部分:成核(右边第一项)、长大(右边第二项)、合并(右边第三项)以及由于固体微观结构不均匀性而引起这三部分的随机起伏(右边第四项).可见,它包含着微裂纹系统随机演化的全部内容.

应该指出,由于固体微观结构不均匀性而引起的随机起伏,除了集中表现于起伏项 $F(N_c, t)$ 外,实际上,本文上列各式中所有的成核率 $q(t, c)$ 、长大速率 $\dot{c}(t, c)$ 、合并几率 $\omega(c, c_i, c_j)$ 及分布函数 $N(t, c)$ 亦都是随机变量.为了将随机方程(14)变成平均值方程,我们将成核率、长大速率、合并几率及分布函数都写成

$$q(t, c) = \langle q(t, c) \rangle + \Delta q(t, c), \quad (17)$$

$$\dot{c}(t, c) = \langle \dot{c}(t, c) \rangle + \Delta \dot{c}(t, c), \quad (18)$$

$$\omega(c, c_i, c_j) = \langle \omega(c_i, c_j, c) \rangle + \Delta \omega(c_i, c_j, c), \quad (19)$$

$$N(t, c) = \langle N(t, c) \rangle + \Delta N(t, c). \quad (20)$$

上列各量右边第一项表示平均值,第二项表示其较小的随机起伏值.注意,这里的平均值仅是指对所有长度相等的微裂纹的平均值.将(17)–(20)式代入(14)式,并将平均值与随机值分开,则得

$$\frac{\partial \langle N(t, c) \rangle}{\partial t} = \langle q(t, c) \rangle - \frac{\partial}{\partial c} [\langle \dot{c}(t, c) \rangle \langle N(t, c) \rangle]$$

$$\begin{aligned}
& + \int dj [\langle \omega(c_i, c_j, c) \rangle \langle N(t, c_i) \rangle \langle N(t, c_j) \rangle \\
& - \langle \omega(c, c_j, c_i) \rangle \langle N(t, c) \rangle \langle N(t, c_j) \rangle], \quad (21) \\
\frac{\partial \Delta N(t, c)}{\partial t} = & \Delta q(t, c) - \frac{\partial}{\partial c} [\langle \dot{c}(t, c) \rangle \Delta N(t, c) - \langle N(t, c) \rangle \Delta \dot{c}(t, c)] \\
& + \int dj \{ [\Delta \omega(c_i, c_j, c) \langle N(t, c_i) \rangle \langle N(t, c_j) \rangle + \langle \omega(c_i, c_j, c) \rangle \\
& \times (\langle N(t, c_j) \rangle \Delta N(t, c_j) + \Delta N(t, c_j) \langle N(t, c_j) \rangle)] \\
& - [\Delta \omega(c, c_j, c_i) \langle N(t, c) \rangle \langle N(t, c_j) \rangle + \langle \omega(c, c_j, c_i) \rangle \\
& \times (\langle N(t, c) \rangle \Delta N(t, c_j) + \Delta N(t, c) \langle N(t, c_j) \rangle)] \} + F(\langle N_c \rangle, t). \quad (22)
\end{aligned}$$

在(22)式中,略去了二次随机项,并以 $F(\langle N_c \rangle, t)$ 代替 $F(N_c, t)$.

这样,(21)式就给出了微裂纹系统的平均密度分布函数随时间变化的方程,其物理意义与(14)式相同,只不过各量都是平均值,不再出现随机起伏的影响.

(22)式则表示微裂纹系统的密度分布函数的起伏值随时间变化的方程.

(14)式和(21)式正都是我们所求的微裂纹系统演化的动力学方程,只不过前者是随机方程,能明显反映微裂纹演化的随机性,后者是平均值方程,便于理论计算.

为了便于书写,略去(21)式中各量的平均值符号 $\langle \rangle$,只记其仍是平均值内容,即(21)式可写为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N(t, c)}{\partial t} = & q(t, c) - \frac{\partial}{\partial c} [\dot{c}(t, c) N(t, c)] \\
& + \int dj [\omega(c_i, c_j, c) N(t, c_i) N(t, c_j) \\
& - \omega(c, c_j, c_i) N(t, c) N(t, c_j)]. \quad (23)
\end{aligned}$$

由于两个微裂纹合并成一个,(14)式和(23)式积分号内的 c_i, c_j 和 c 间总存在一种关系式,使得 c_i 可由 c_j 和 c 表示,从而可由方程式中消去.例如,当合并前后微裂纹长度不变时,则积分号内前一项中有 $c_i + c_j = c$,后一项中有 $c + c_j = c_i$.

若所有微裂纹核的长度相等,且以 c_0 表示,则

$$q(t, c) = q(t) \delta(c - c_0). \quad (24)$$

$q(t)$ 表示 t 时单位时间单位体积内微裂纹成核的平均数目.

当已知 $q(t, c)$, $\dot{c}(t, c)$ 和 $\omega(c_i, c_j, c)$, 就可由(23)式解出 $N(t, c)$. 怎样才得知 $q(t, c)$, $\dot{c}(t, c)$ 和 $\omega(c_i, c_j, c)$? 这就要求从微裂纹演化的微观机理出发来进行理论推算. 由于脆性断裂、蠕变断裂、疲劳断裂等各种断裂的类型和微观机理不同,它们的成核率 $q(t, c)$ 、长大速率 $\dot{c}(t, c)$ 和合并几率 $\omega(c_i, c_j, c)$ 将由哪些基本物理量决定,以什么样的函数形式决定,都将互不相同. 甚至对于同一类型的断裂(如同是脆性断裂),由于点阵结构、缺陷、显微组织及电子结构等结构层次的不同, $q(t, c)$, $\dot{c}(t, c)$ 及 $\omega(c_i, c_j, c)$ 亦将有所不同. 由此可见: 微裂纹演化过程的普遍性和演化机理的特殊性,动力学方程的相同性和方程系数的差异性,这就构成了各种断裂过程中共性和个性的对立统一.

解得了 $N(t, c)$, 就可进一步计算断裂过程中各个有关的宏观力学量^[6],从而有可能

实现微观与宏观的统一。

这样,从本文来看,如何根据各自合适的微观机理,从理论上正确推算出各种断裂的 $q(t, c)$, $\dot{c}(t, c)$ 和 $\omega(c_i, c_j, c)$, 显然是断裂理论中一项关键课题。

下面我们结合具体物理内容来讨论一下(23)式解的性质。

因为在外应力作用下,固体内部总存在着微裂纹,且因未断裂时,固体内部不会存在无限大的裂纹,故应有

$$\begin{aligned} a \quad & 0 < N(t, c) < \infty \\ b \quad & N(t, c \rightarrow \infty) = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

至于 $N(t, c)$ 所满足的起始条件,可能有下列三种情况:

1. 固体内部原先不存在导致断裂的微裂纹,则

$$N(t=0, c) = 0. \quad (26)$$

2. 固体内部原先只存在一个裂纹,其长度为 c_1^0 , 则

$$N(t=0, c) = \delta(c - c_1^0)/V \quad (27)$$

V 为固体的体积。

3. 固体内部原先就存在一定数目的微裂纹,其密度分布函数为 $N_0(c)$, 则

$$N(t=0, c) = N_0(c). \quad (28)$$

最后,作点说明。本文主旨是将非平衡统计的概念和方法推广用来统一研究各种断裂过程中微裂纹的演化,以试图建立统一的断裂理论。同时,由于数学方法上是从较严格的多元主方程出发,也得到了一些新结果。第一,本文的随机方程式(12)–(14)是过去工作中没有的,它们能从理论上显示微裂纹演化过程的随机性。第二,本文的平均值方程式(21)或(23)是个非线性方程,其非线性项来自两个微裂纹的合并,犹如玻耳兹曼方程的非线性项来自两个粒子的碰撞,而过去所用的是个线性方程。这些都可以说是对过去工作的改善。

参 考 文 献

- [1] B. R. Lawn and T. R. Wilshaw, *Fracture of Brittle Solids*, (1975).
- [2] D. M. R. Taplin ed., *Fracture*, V. 2A (1977).
- [3] F. Garofalo, *Fundamentals of creep and creep rupture in metals*, (1965).
- [4] В. Р. Регель, А. И. Слущер, Э. Е. Томашевский, *Кинетическая природа прочности твердых тел*, (1974).
- [5] S. Kocanada, *Fatigue failure of metals*. (1978).
- [6] 邢修三, *物理学报*, **29**(1980), 718.
- [7] D. Bedeaux, *Phys. Letters*, **62A**(1977). 10.
- [8] L. Garrido *et al.* ed., *Stochastic process in Nonequilibrium Systems*, (1978).

THE STOCHASTIC FORMULATION OF MICROCRACKS EVOLUTION

XING XIU-SAN

(Institute of Atomic Energy, Academia Sinica)

ABSTRACT

The general problem in various fracture processes microcracks or voids evolution has been investigated by employing non-equilibrium statistical concept and method. The kinetic equation of microcrack evolution is derived from multivariated master equation describing the process of microcracks evolution. The way how to connect micro mechanism with macro process is indicated. And the inherent properties of distribution function of microcracks is discussed.

面心立方格子上 Ising 自旋 $I(1)$ 的反铁磁性 ——配分函数的级数展开法

徐 文 兰¹⁾ 李 荫 远

(中国科学院物理研究所)

1981 年 3 月 13 日收到

提 要

本文采用与文献[1]完全相类似的方法作出一般化 Ising 模型 $s = 1$ 在面心立方格子(fcc)上最近邻相互作用的反铁磁系统的统计理论,即用 Padé 近似式处理配分函数的高、低温幂级数有限项展开式,得出其反铁磁-顺磁转变为一阶相变。 $T_c = 1.33J/k$, 小于 $I(1/2)$ 相应的相变点。文中算出了相关的热力学量如内能、潜热、熵、比热、长程和短程序参量,以及磁化率等。值得指出的是:(1) fcc 上反铁磁-顺磁相变属于一阶,这是由格子密堆积的拓扑特征所决定,与 s 的大小无关;(2) $T_c(s)$ 随 s 的增加而缓慢地下降。

一、引 言

文献[1]²⁾用配分函数级数展开法得出 $s = 1/2$ 在 fcc 上最近邻相互作用的 I 型反铁磁性的反铁磁-顺磁相变为一阶的类型。这一方法已显示出不但可行,而且原则上和实际上都比对统计原理作了简化的 Kikuchi 方法或仿化学方法要较为优越。配分函数的幂级数展开只能计算到为数不多的有限项,但在铁磁-顺磁的二阶相变的研究中,幂级数展开法借助于 Padé 近似式早已卓见成效。文献[1]中也使用 Padé 近似式,得到高温无序态与低温有序态的自由能曲线的相交点,定出了 $I(1/2)$ 的反铁磁-顺磁的一阶相变的转变温度为 $T_c = 1.74J/k$ 。热力学量在 T_c 以上和以下分别用相应的级数展开式和 Padé 方法计算,它们在 T_c 处均呈现一突变。

对于一般化 Ising 模型 $I(s)$ 只考虑最近邻作用的反铁磁体系

$$\mathcal{H} = \frac{J}{s^2} \sum_{\langle ij \rangle} s_{ji} s_{ji} - \frac{H}{s} \sum_i s_{ji}, \quad (1)$$

式中 s_{ji} 可取 $2s + 1$ 个值: $-s, -(s-1), \dots, (s-1), s$, $J > 0$, H 为约化磁场, $\sum_{\langle ij \rangle}$ 为对最近邻自旋对求和。式中 s^2 和 s 的引入起“归一”作用,即保证对不同的 s 值,近邻自旋间相互作用最大值均等于 J , 单个自旋在外场中最大能量为 H 。

本文用类似于文献[1]的方法处理 fcc 上 $s = 1$ 的 Ising 反铁磁-顺磁相变。其目的

1) 中国科学技术大学北京研究生院研究生。

2) 文献[1]所引 Danielian 的计算结果 $T_c = 1.2 J/k$ 应改为 $T_c = 2.4 J/k$ 。

在得出 s 大小对相变类型有无影响, 相变温度随 s 增大的变化的一般性结论.

我们在求配分函数和零场磁化率高温展开的系数时采用了文献[2]中提供的数据, 必须注意到文献[2]中(2.35)和(2.36)两式的 $\bar{K}$ 应为 $K = J/kT^0$. 本文分别以下标 l 和 h 区别低温、高温的量.

二、自由能的低温展开

当 $s = 1$ 时, 每个自旋的 s_x 可能取值为 $-1, 0, +1$. 但系统在外场 $|H| < 4J$ 时的基态如图 1 所示, 即不出现 s_x 为 0 的情形. 在以下诸式中, $0 \leq H < 4J$. 以后提到“自旋取值”指的就是 s_x 取值.

与文献[1]中同样的理由, 在引入次近邻相互作用 0^+ 后, 排除由反位相畴引起的基态简并. 在图 1 中如把 $+1$ 自旋所占的格点称为 α 座, -1 自旋所占的格点称为 β 座, 则整个 fcc 格子分成 α, β 两个次格子. 如在 α 座上置 -1 自旋、 β 座上置 $+1$ 自旋, 则同样构成一个基态. 为了取消基态的这种两重简并, 我们引入一个分别加在 α, β 次格子上的交错场 $H_\alpha = H + h_\alpha$ 和 $H_\beta = H - h_\beta$. 取 h_α, h_β 为 0^+ 使图 1 的状态为唯一的基态²⁾. 基态能量为

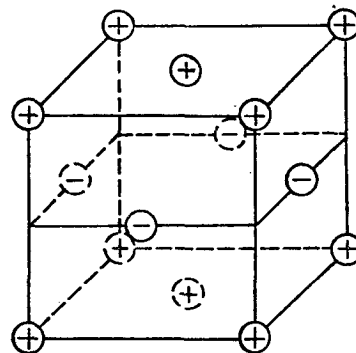


图 1

$$E_0 = -2NJ - \frac{N}{2} (H_\alpha - H_\beta).$$

从这一基态出发, 把同时变化若干个自旋的集合称为集团. 与文献[1]不同, 这儿由于自旋可取 $+1, 0$ 和 -1 , 变化一个集团中的各个自旋其结果可以有几种不同的位形. 整个格子由于集团位形的变化使能量自 E_0 提高到 $E = E_0 + \Delta E$.

$$\begin{aligned} \Delta E = & 4n^0J + 8n^\pm J + \delta_0J + 2\delta_1J + 4\delta_2J + H_\alpha(n_+^0 + 2n_+^-) \\ & - H_\beta(n_-^0 + 2n_-^\pm), \end{aligned} \quad (2)$$

式中 n^0 为集团内自旋变为 0 的个数. $n^\pm$ 为集团内自旋由 $+1$ 变为 -1 , 由 -1 变为 $+1$ 的总个数; δ_0 为变化后成为 $0-0$ 那些键原来是 $+1-+1$ 或 $-1--1$ 的个数减去原来是 $+1--1$ 的个数之差; δ_1 为变化后成为 $0-+1$ 或 $0-+1$ 那些键原来是 $+1-+1$ 或 $-1--1$ 的个数减去原来是 $+1--1$ 的个数之差; δ_2 为变化后两端均不为 0 的那些键原来是 $+1-+1$ 或 $-1--1$ 的个数减去原来是 $+1--1$ 的个数之差; n_+^0 为由 $+1$ 变为 0 的自旋个数; n_-^0 为由 -1 变为 0 的自旋个数; n_+^- 为由 $+1$ 变为 -1 的自旋个数; n_-^+ 为由 -1 变为 $+1$ 的自旋个数; $n^0 = n_+^0 + n_-^0$; $n^\pm = n_+^- + n_-^+$. (2) 式的推导见附录.

本文计算了 69 个位形, 见图 2. 图中分别画出集团变化前、后的位形. 表 1 则给出

1) 文献[3]中给出 χ_0 公式是 K 的幂级数, 通过计算首项系数也检查出文献[2]中(2.35)和(2.36)两式的 $\bar{K}$ 系 K 之误.

2) 图 1 中, 垂直于 z 轴的晶面是 α 层 β 层交错排列的. 当然 α, β 次格子可以互换. 在垂直于 x, y 轴的晶面中也可作这样的 α, β 次格子划分. 由此带来基态 $2 \times 3 = 6$ 重简并. 本文仅考虑单畴的有序态, 认定了图 1 为唯一的基态.

相应的 ΔE 以及在 N 个自旋格子上可能实行此种位形变化的总数 g

设 $u = \exp(-J/kT)$, $\mu_\alpha = \exp(-H_\alpha/kT)$, $\mu_\beta = \exp(-H_\beta/kT)$, 则系统的配分函数

$$Z_{1N} = \sum g \exp[-(E_0 + \Delta E)/kT]$$

$$= u^{-2N} \mu_\alpha^{-\frac{N}{2}} \mu_\beta^{-\frac{N}{2}} \left\{ 1 + \frac{N}{2} (\mu_\alpha + \mu_\beta^{-1}) u^4 + 4N \mu_\alpha \mu_\beta^{-1} u^7 \right\}$$

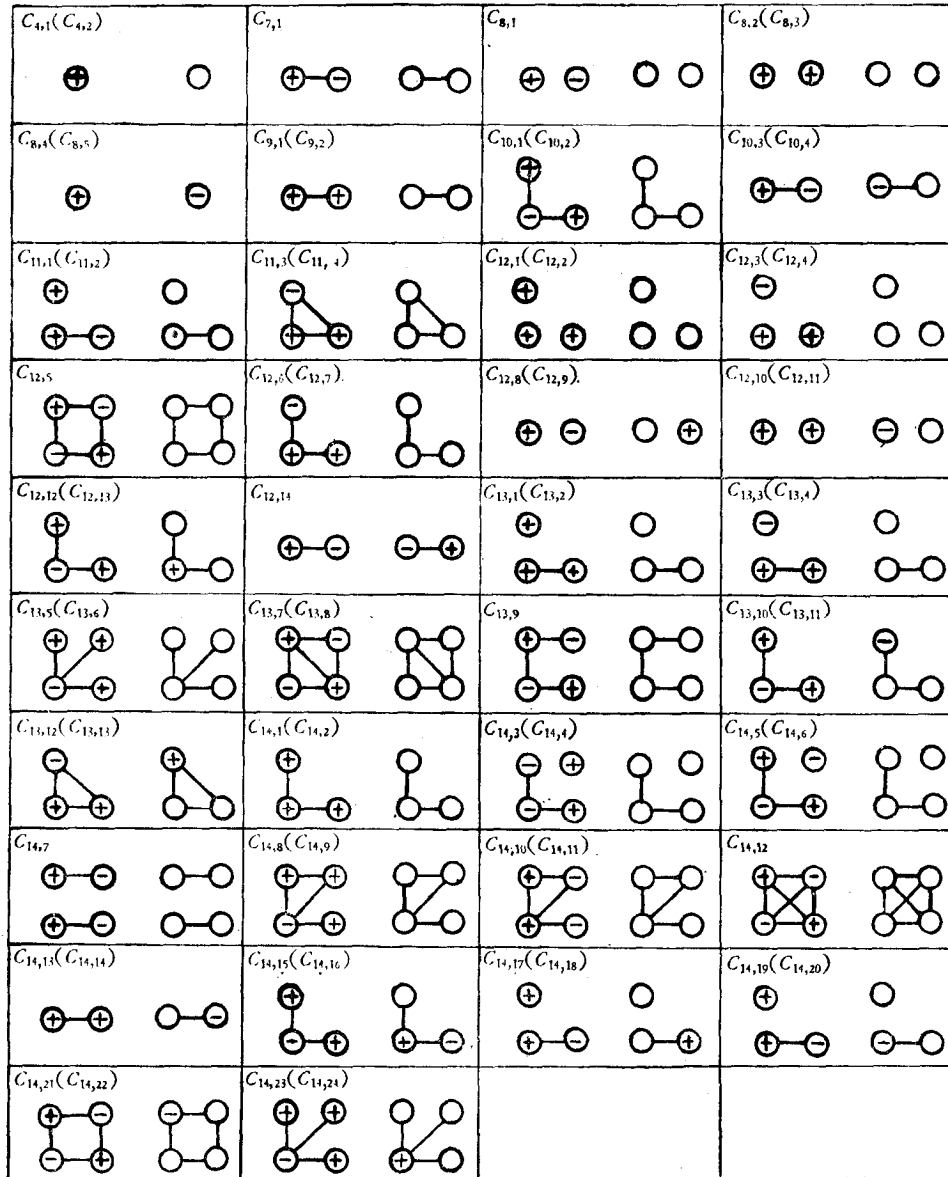


图 2

⊕——自旋取+1; ⊖——自旋取-1; ○——自旋取0. 每个图左面表示集团翻转前位形, 右面表示集团翻转后位形, 括号内编号表示将该图中⊕变为⊖, ⊖变为⊕, ○不变的位形

表 1

编号	ΔE	g	编号	ΔE	g
$C_{4,1}$	$4J + H_\alpha$	$\frac{N}{2}$	$C_{12,7}$	$12J + H_\alpha - 2H_\beta$	$8N$
$C_{4,2}$	$4J - H_\beta$	$\frac{N}{2}$	$C_{12,8}$	$12J + H_\alpha - 2H_\beta$	$\frac{N}{2}(\frac{N}{2} - 8)$
$C_{7,1}$	$7J + H_\alpha - H_\beta$	$4N$	$C_{12,9}$	$12J + 2H_\alpha - H_\beta$	$\frac{N}{2}(\frac{N}{2} - 8)$
$C_{8,1}$	$8J + H_\alpha - H_\beta$	$\frac{N}{2}(\frac{N}{2} - 8)$	$C_{12,10}$	$12J + 3H_\alpha$	$\frac{N}{2}(\frac{N}{2} - 5)$
$C_{8,2}$	$8J + 2H_\alpha$	$\frac{N}{4}(\frac{N}{2} - 5)$	$C_{12,11}$	$12J - 3H_\beta$	$\frac{N}{2}(\frac{N}{2} - 5)$
$C_{8,3}$	$8J - 2H_\beta$	$\frac{N}{4}(\frac{N}{2} - 5)$	$C_{12,12}$	$12J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$10N$
$C_{8,4}$	$8J + 2H_\alpha$	$\frac{N}{2}$	$C_{12,13}$	$12J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$10N$
$C_{8,5}$	$8J - 2H_\beta$	$\frac{N}{2}$	$C_{12,14}$	$12J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{9,1}$	$9J + 2H_\alpha$	N	$C_{13,1}$	$13J + 3H_\alpha$	$N(\frac{N}{2} - 8)$
$C_{9,2}$	$9J - 2H_\beta$	N	$C_{13,2}$	$13J - 3H_\beta$	$N(\frac{N}{2} - 8)$
$C_{10,1}$	$10J + 2H_\alpha - H_\beta$	$10N$	$C_{13,3}$	$13J + 2H_\alpha - H_\beta$	$N(\frac{N}{2} - 12)$
$C_{10,2}$	$10J + H_\alpha - 2H_\beta$	$10N$	$C_{13,4}$	$13J + H_\alpha - 2H_\beta$	$N(\frac{N}{2} - 12)$
$C_{10,3}$	$10J + 2H_\alpha - H_\beta$	$4N$	$C_{13,5}$	$13J + 3H_\alpha - H_\beta$	$8N$
$C_{10,4}$	$10J + H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$	$C_{13,6}$	$13J + H_\alpha - 3H_\beta$	$8N$
$C_{11,1}$	$11J + 2H_\alpha - H_\beta$	$4N(\frac{N}{2} - 10)$	$C_{13,7}$	$13J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{11,2}$	$11J + H_\alpha - 2H_\beta$	$4N(\frac{N}{2} - 10)$	$C_{13,8}$	$13J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{11,3}$	$11J + 2H_\alpha - H_\beta$	$4N$	$C_{13,9}$	$13J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$92N$
$C_{11,4}$	$11J + H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$	$C_{13,10}$	$13J + 3H_\alpha - H_\beta$	$20N$
$C_{12,1}$	$12J + 3H_\alpha$	$\frac{N^3}{48} - \frac{5}{8}N^2 + \frac{31}{6}N$	$C_{13,11}$	$13J + H_\alpha - 3H_\beta$	$20N$
$C_{12,2}$	$12J - 3H_\beta$	$\frac{N^3}{48} - \frac{5}{8}N^2 + \frac{31}{6}N$	$C_{13,12}$	$13J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{12,3}$	$12J + 2H_\alpha - H_\beta$	$\frac{N^3}{16} - \frac{21}{8}N^2 + 30N$	$C_{13,13}$	$13J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{12,4}$	$12J + H_\alpha - 2H_\beta$	$\frac{N^3}{16} - \frac{21}{8}N^2 + 30N$	$C_{14,1}$	$14J + 3H_\alpha$	$3N$
$C_{12,5}$	$12J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$2N$	$C_{14,2}$	$14J - 3H_\beta$	$3N$
$C_{12,6}$	$12J + 2H_\alpha - H_\beta$	$8N$	$C_{14,3}$	$14J + 3H_\alpha - H_\beta$	$5N(N - 24)$

表 1 (续)

编号	ΔE	g	编号	ΔE	g
$C_{14,4}$	$14J + H_\alpha - 3H_\beta$	$5N(N - 24)$	$C_{14,15}$	$14J + 3H_\alpha - 2H_\beta$	$20N$
$C_{14,5}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$N(5N - 146)$	$C_{14,16}$	$14J + 2H_\alpha - 3H_\beta$	$20N$
$C_{14,6}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$N(5N - 146)$	$C_{14,17}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N\left(\frac{N}{2} - 10\right)$
$C_{14,7}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$2N(4N - 117)$	$C_{14,18}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$4N\left(\frac{N}{2} - 10\right)$
$C_{14,8}$	$14J + 3H_\alpha - H_\beta$	$16N$	$C_{14,19}$	$14J + 3H_\alpha - H_\beta$	$4N\left(\frac{N}{2} - 10\right)$
$C_{14,9}$	$14J + H_\alpha - 3H_\beta$	$16N$	$C_{14,20}$	$14J + H_\alpha - 3H_\beta$	$4N\left(\frac{N}{2} - 10\right)$
$C_{14,10}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$24N$	$C_{14,21}$	$14J + 3H_\alpha - 2H_\beta$	$4N$
$C_{14,11}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$24N$	$C_{14,22}$	$14J + 2H_\alpha - 3H_\beta$	$4N$
$C_{14,12}$	$14J + 2H_\alpha - 2H_\beta$	$2N$	$C_{14,23}$	$14J + 3H_\alpha - 2H_\beta$	$8N$
$C_{14,13}$	$14J + 3H_\alpha$	$2N$	$C_{14,24}$	$14J + 2H_\alpha - 3H_\beta$	$8N$
$C_{14,14}$	$14J - 3H_\beta$	$2N$			

$$\begin{aligned}
& + \left[\frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} - 8 \right) \mu_\alpha \mu_\beta^{-1} + \frac{N}{4} \left(\frac{N}{2} - 5 \right) (\mu_\alpha^2 + \mu_\beta^{-2}) \right. \\
& + \left. \frac{N}{2} (\mu_\alpha^2 + \mu_\beta^{-2}) \right] u^8 + N(\mu_\alpha^2 + \mu_\beta^{-2}) u^9 \\
& + [10N(\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) + 4N(\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2})] u^{10} \\
& + \left[4N \left(\frac{N}{2} - 10 \right) (\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) + 4N(\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-1}) \right] u^{11} \\
& + \left[\left(\frac{N^3}{48} - \frac{5}{8} N^2 + \frac{31}{6} N \right) (\mu_\alpha^3 + \mu_\beta^{-3}) + \left(\frac{N^3}{16} - \frac{21}{8} N^2 + 30N \right) \right. \\
& \times (\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) + 2N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} + 8N(\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) \\
& + \left. \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} - 8 \right) (\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) + \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} - 5 \right) (\mu_\alpha^3 + \mu_\beta^{-3}) \right. \\
& + 20N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} + 4N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} \left. \right] u^{12} + \left[N \left(\frac{N}{2} - 8 \right) (\mu_\alpha^3 + \mu_\beta^{-3}) \right. \\
& + N \left(\frac{N}{2} - 12 \right) (\mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-2}) + 8N(\mu_\alpha^3 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-3}) \\
& + 8N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} + 92N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} + 20N(\mu_\alpha^3 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-3}) + 8N \mu_\alpha^2 \mu_\beta^{-2} \left. \right] u^{13} \\
& + \left[3N(\mu_\alpha^3 + \mu_\beta^{-3}) + 5N(N - 24)(\mu_\alpha^3 \mu_\beta^{-1} + \mu_\alpha \mu_\beta^{-3}) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2N(5N - 146)\mu_a^2\mu_\beta^{-2} + 2N(4N - 117)\mu_a^2\mu_\beta^{-2} \\
& + 16N(\mu_a^3\mu_\beta^{-1} + \mu_a\mu_\beta^{-3}) + 48N\mu_a^2\mu_\beta^{-2} + 2N\mu_a^2\mu_\beta^{-2} \\
& + 2N(\mu_a^3 + \mu_\beta^{-3}) + 20N(\mu_a^3\mu_\beta^{-2} + \mu_a^2\mu_\beta^{-3}) \\
& + 8N\left(\frac{N}{2} - 10\right)\mu_a^2\mu_\beta^{-2} + 4N\left(\frac{N}{2} - 10\right)(\mu_a^3\mu_\beta^{-1} + \mu_a\mu_\beta^{-3}) \\
& + 4N(\mu_a^3\mu_\beta^{-2} + \mu_a^2\mu_\beta^{-3}) + 8N(\mu_a^3\mu_\beta^{-2} + \mu_a^2\mu_\beta^{-3}) \Big] u^{14} + \dots \Big\}. \quad (3)
\end{aligned}$$

单个格点配分函数 $Z = \lim_{N \rightarrow \infty} (Z_N)^{\frac{1}{N}}$, 单个格点自由能低温表达式为 $F_l = \frac{-kT}{N} \ln Z_{lN}$. 在

$H_a = H_\beta = 0$ 时,

$$\begin{aligned}
F_l = -2J - kTu^4 \Big[1 + 4u^3 - \frac{11}{2}u^4 + 2u^5 + 28u^6 - 72u^7 \\
+ \frac{298}{3}u^8 + 124u^9 - 770u^{10} + \dots \Big]. \quad (4)
\end{aligned}$$

三、相变点

由文献[2]中给出的高温自由能和磁化率公式都是对铁磁而言的, 用于反铁磁, 符号应是正负相间的. 对于 $s = 1$, 经计算有

$$\begin{aligned}
F_h = -kT \ln 3 - 6kTK^2[0.2222 - 0.3951K + 1.3519K^2 - 4.9383K^3 \\
+ 19.911K^4 - 86.8466K^5 + 401.1454K^6 - 1939.0025K^7 \\
+ 9719.1743K^8 - 50174.84K^9 + 265421.119K^{10} \\
- 1433111.875K^{11} + \dots]. \quad (5)
\end{aligned}$$

对(4)和(5)式分别作 Padé 近似. 图 3 画出高低温自由能曲线. $[L, M]$ 表示所用的 Padé 式. 在低温下可作的最高级 Padé 近似式为 $[5, 5]$, 但因在相变点附近发散, 没

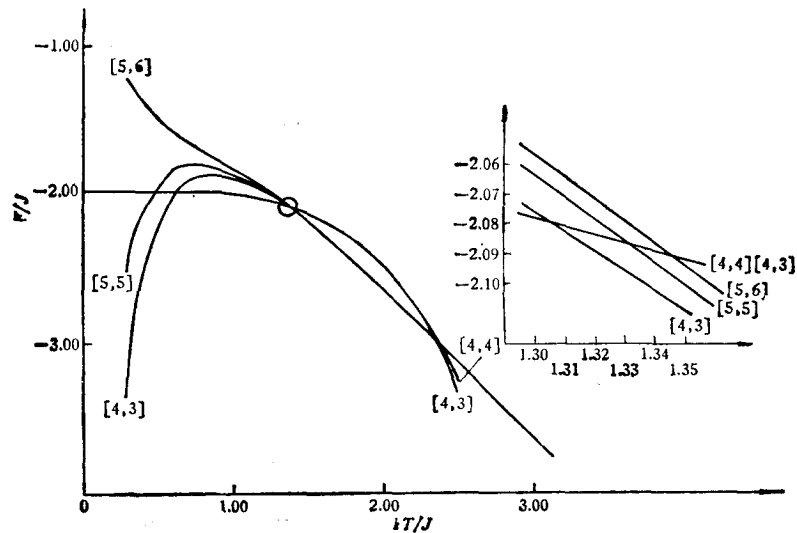


图 3

有采用. 图 3 的右上角以 20:1 画出相变点附近局部放大图.

取 $T_c = 1.33J/k$ 为相变点. 不同 Padé 近似基本重合的范围就是级数适用范围, 因此对图 3 中自由能曲线的另外两个交点不予理会.

顺便指出, 这里采用的高温展开变量为 $K = J/kT$, 而不是文献 [1] 中用的 $w = \tanh(J/kT)$, 对于 $I(1/2)$, 我们也作了以 $K = J/kT$ 为变数的级数展开图形. 图 4 表明两者在较高温段内(包括 $T_c(1/2)$ 的附近)完全一致.

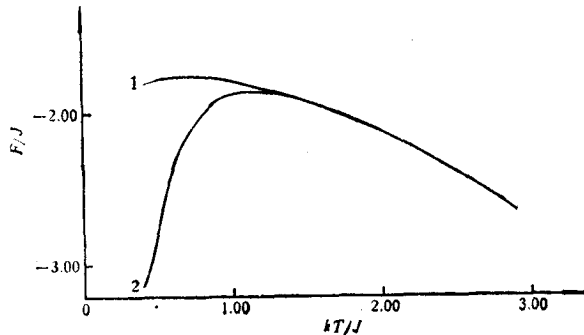


图 4

1——以 K 为变数的展开; 2——以 $w = \tanh K$ 为变数的展开

四、各种物理量

1. 次格子磁化强度和长程序参量

次格子磁化强度

$$M_\alpha = -\left(\frac{\partial F}{\partial H_\alpha}\right)_{H_\alpha=H_\beta=0}, \quad M_\beta = -\left(\frac{\partial F}{\partial H_\beta}\right)_{H_\alpha=H_\beta=0}.$$

显然 $M_\alpha = -M_\beta$. 定义长程序参量 $\mathcal{S} = M_\alpha - M_\beta$, 得出

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 = 1 - 2u^4 \left[\frac{1}{2} + 4u^3 - \frac{11}{2}u^4 + 2u^5 + 42u^6 - 108u^7 \right. \\ \left. + 167u^8 - 268u^9 - 1513u^{10} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

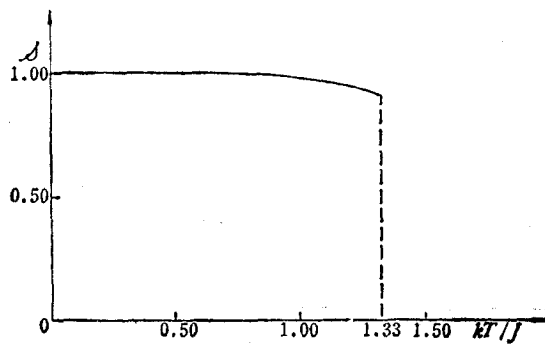


图 5

在高温无序时, 自旋随机分布, 必然有 $\mathcal{S}_h = 0$, $\mathcal{S}$ 对温度的曲线见图 5.

2. 磁化率

令 $h_\alpha = h_\beta = 0$, 则 $H_\alpha = H_\beta = H$, $\mu = e^{-H/kT}$,

则

$$\begin{aligned} F_l = & -2J - kT \left\{ \frac{1}{2}(\mu + \mu^{-1})u^4 + 4u^7 - \left[4 + \frac{3}{4}(\mu^2 + \mu^{-2}) \right] u^8 \right. \\ & + (\mu^2 + \mu^{-2})u^9 + 14(\mu + \mu^{-1})u^{10} - 36(\mu + \mu^{-1})u^{11} \\ & + \left[\frac{8}{3}(\mu^3 + \mu^{-3}) + 34(\mu + \mu^{-1}) + 26 \right] u^{12} \\ & + [-8(\mu^3 + \mu^{-3}) + 28(\mu^2 + \mu^{-2}) - 12(\mu + \mu^{-1}) + 108] u^{13} \\ & + [5(\mu^3 + \mu^{-3}) - 144(\mu^2 + \mu^{-2}) \\ & \left. + 32(\mu + \mu^{-1}) - 556] u^{14} + \dots \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_l = & - \left(\frac{\partial^2 F_l}{\partial H^2} \right)_{H=0} = \frac{u^4}{kT} (1 - 6u^4 \\ & + 8u^5 + 28u^6 - 72u^7 + 116u^8 \\ & + 56u^9 - 998u^{10} + \dots). \quad (8) \end{aligned}$$

由文献 [2] 可得

$$\begin{aligned} \chi_h = & \frac{2}{3kT} [1 - 8K + 60K^2 - 438.6667K^3 \\ & + 3158.5556K^4 - 22517.4K^5 \\ & + 159427.6357K^6 - 1123122.278K^7 \\ & + 7881808.128K^8 - 5514586.96K^9 \\ & + 384893521.9K^{10} - 2680979865K^{11} \\ & + 18642873000K^{12} + \dots], \quad (9) \end{aligned}$$

磁化率曲线见图 6.

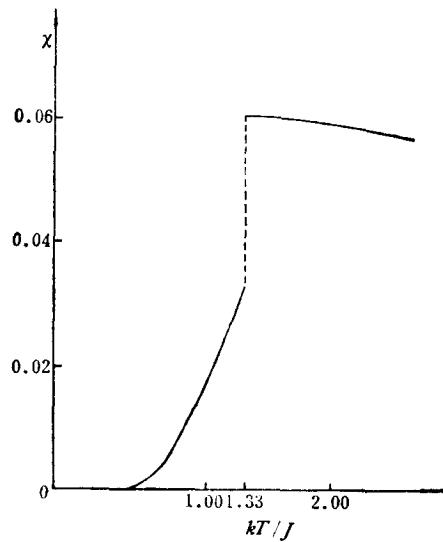


图 6

3. 熵、内能和比热

熵 $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, 零场下 S 的低温、高温部份分别为

$$\begin{aligned} S_l = & k u^4 \left[1 + 4u^3 - \frac{11}{2}u^4 + 2u^5 + 28u^6 - 72u^7 + \frac{298}{3}u^8 + 124u^9 - 770u^{10} + \dots \right] \\ & + \frac{J}{T} [4 + 28u^3 - 44u^4 + 18u^5 + 280u^6 - 792u^7 + 1192u^8 + 1612u^9 \\ & - 10780u^{10} + \dots], \quad (10) \\ S_h = & k \ln 3 + 6kK^2(0.2222 - 0.3951K + 1.3519K^2 - 4.9383K^3 + 19.911K^4 \\ & - 86.8466K^5 + 401.1454K^6 - 1939.0025K^7 + 9719.1743K^8 \\ & - 50174.84K^9 + 265421.119K^{10} - 1433111.875K^{11}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -6kK^2(0.4444 - 1.1852K + 5.4074K^2 - 24.6914K^3 + 119.466K^4 \\
& - 607.9265K^5 + 3209.1631K^6 - 17451.0222K^7 + 97191.7432K^8 \\
& - 551923.2393K^9 + 3185053.0428K^{10} - 18630454.37K^{11} + \cdots), \quad (11)
\end{aligned}$$

熵曲线见图 7.

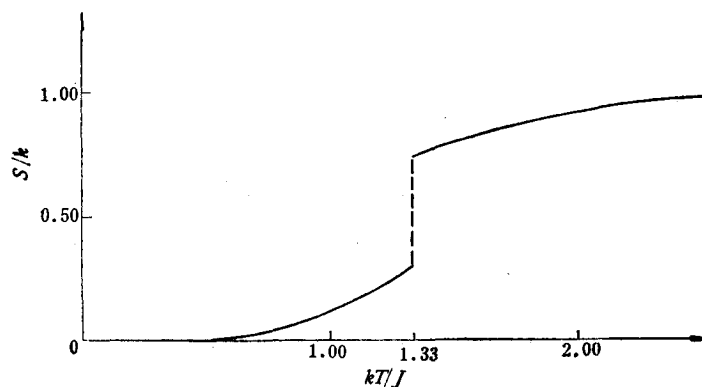


图 7

$$\text{内能 } U = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z), \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

$$\begin{aligned}
U_l = & -2J + Ju^4(4 + 28u^3 - 44u^4 + 18u^5 + 280u^6 - 792u^7 \\
& + 1192u^8 + 1612u^9 - 10780u^{10} + \cdots), \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_h = & -6KJ(0.4444 - 1.1852K + 5.4074K^2 - 24.6914K^3 + 119.466K^4 \\
& - 607.9265K^5 + 3209.1631K^6 - 17451.0222K^7 + 97191.7432K^8 \\
& - 551923.2393K^9 + 3185053.428K^{10} - 18630454.37K^{11} + \cdots). \quad (13)
\end{aligned}$$

内能曲线见图 8

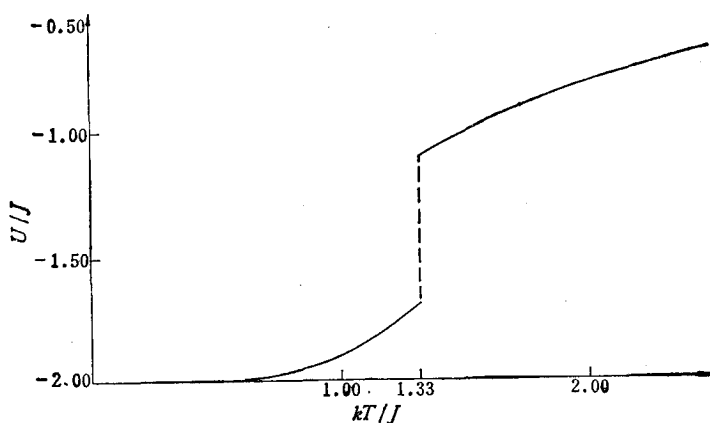


图 8

$$\text{比热 } c = \frac{dU}{dT}$$

$$c_l = \frac{J^2 u^4}{kT^2} (16 + 196u^3 - 352u^4 + 162u^5 + 2800u^6 - 8712u^7 + 14304u^8 + 20956u^9 - 150920u^{10} + \cdots), \quad (14)$$

$$c_h = 6kK^2(0.4444 - 2.3704K + 16.2222K^2 - 98.7656K^3 + 597.33K^4 - 3647.559K^5 + 22464.1417K^6 - 139608.1776K^7 + 874725.6888K^8 - 5519232.393K^9 + 35035587.7K^{10} - 223565452.4K^{11} + \cdots). \quad (15)$$

比热曲线见图 9.

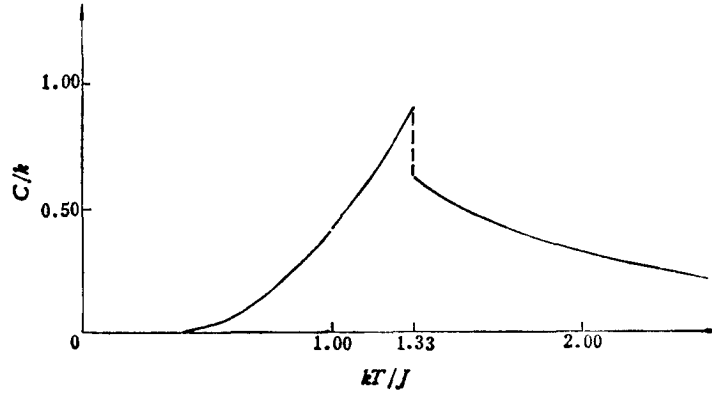


图 9

4. 短程序参量

定义

$$r = -\frac{1}{2N} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right\rangle = -\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial J} = -\frac{1}{2} \frac{U}{J}.$$

将图 8 重新标定坐标, 即可得出短程序参量的曲线, 见图 10.

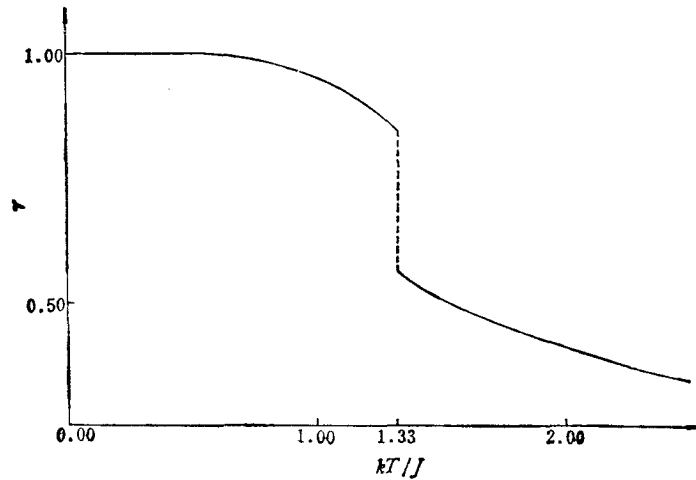


图 10

五、讨 论

文献[2]系统地讨论了自旋量子数 s 与铁磁 $I(s)$ 临界行为的关系. fcc 上 $I(s)$ 铁磁-顺磁相变是二阶的, 各种临界指数值都不受 s 大小的影响. 文献[2]列出了 $s = 1/2, 1, \dots, 5/2$ 的 T_c , 其中 $s = 1/2$ 时, $T_c = 9.8290J/k$; $s = 1$ 时, $T_c = 6.8211J/k$, 即有 $T_c(s=1) < T_c(s=1/2)$. 一般言之, T_c 随 s 的增加而下降.

本文讨论的 fcc 上 Ising 自旋 $I(1)$ 反铁磁-顺磁相变是一阶的. 这一点从自由能曲线上明显看出. 可见无论 $I(1/2)$ 还是 $I(1)$ 都不出现连续相变. 这一事实无疑意味着 fcc 和体心立方 (bcc), 简单立方 (sc) 以及平方格子 (sq) 上最近邻相互作用的反铁磁-顺磁转变属于不同类型系来自其密堆积格子的拓扑因素, 而与 $s = 1/2, 1, \dots$ 无关. (在数学上疏堆积格子和密堆积格子分别称为偶格子和奇格子.) 因此可以推论 $I(3/2), I(2), \dots$ 在 fcc 上的反铁磁-顺磁相变亦为一阶的. 随着 s 的增大, 低温展开式计算势必更加繁琐. 但从 $T_c(s=1/2)$ 大于 $T_c(s=1)$ 的计算结果, 大体上可以推断反铁磁-顺磁相变的 T_c 会随 s 的增大而下降. 简单地说, s 取任何 $\geq 1/2$ 的值时, $s_{zi} = -s, -s+1, \dots, s-1, s$ 等的原几率均等于 $1/(2s+1)$. 在较低温度下自旋间的相互作用使原几率逐渐被破坏, 最后次格子上分别出现 $s_{zi} = s$ 和 $-s$ 的长程有序态. $s = 1/2$, 两相邻自旋的相互作用为 $\pm J$; 而 $s > 1/2$ 的相互作用是多样的, 即为 $\pm J, \pm \frac{s(s-1)}{s^2} J, \pm \frac{(s-1)^2}{s^2} J, \dots$, 不难看出, 自旋的相互作用随 s 的增加而减小, 从而削弱了整个格子中出现有序化分布的倾向. 对于铁磁性问题, 情况也是相同的.

表 2 列出了 $I(1/2)$ 和 $I(1)$ 反铁磁-顺磁相变点和物理量的计算结果, 以便对比. 上标 + 和一分别表明了 T 从高温一边和低温一边趋向 T_c 时的值. 相应于 $I(1)$ 的诸值, 我们采取与定出 $kT_c/J = 1.33$ 所用的 padé 近似式来计算, 即高温用 $[5, 5]$ 表示, 低温用 $[4, 4]$ 表示.

表 2

s	kT_c/J	Q/J	$\Delta S/k$	$\Delta \mathcal{G}$	r^+	r^-	$J\chi^+$	$J\chi^-$	c^+/k	c^-/k
1/2	1.74	0.44	0.25	0.92	0.68	0.90	0.063	0.027	0.30	1.10
1	1.33	0.57	0.43	0.91	0.56	0.85	0.061	0.031	0.77	0.90

表 2 中的潜热 $Q = T_c \Delta S = \Delta U$, χ 的单位为 m^2/J , m 为自旋的磁矩, 在本文中使用约化磁场, 相当于 $m = 1$.

在文献[1]中解析地证明了 fcc 上 $I(1/2)$ 最近邻相互作用反铁磁相变的 $T_c(H)$ 对 H 的曲线在 $H = 0$ 点 T_c 为一极大值, 同样的数学步骤也可以肯定 $I(1)$ 的 $T_c(H)$ 曲线在 $H = 0$ 点出现极大值.

文献[4—6]分别用 $I(1)$ 模型表述了三元合金, $\text{He}^3\text{-He}^4$ 混合物, 二元格子气体系. 但是那里的 $I(1)$ 是更为广泛的一类 Ising 体系, 其哈密顿量除包含 (1) 式的项外, 尚有

$\Sigma s_{ix}^2, \Sigma s_{ix}^2 s_{jx}^2$ 项. 上述各文献用平均场近似或格林函数法得出一些结论. 可以断言, 对这样的 Ising 体系, 级数展开法将要复杂得多.

附 录

低温激发态 ΔE

低温激发态即接近基态能量的激发态只在涉及很有限几个格点的集团中改变基态的自旋位形. 设在该集团处于基态时, 其中的第 i 个自旋有 a_i 个与之相同的近邻, b_i 个与之相异的近邻也在集团内. 那么这第 i 个自旋与它的 $a_i + b_i$ 个近邻构成的键当然也在集团内. 下面考察集团的自旋位形变化后自旋和键变化情况. 现不妨设第 i 个自旋是 $+1$, 则基态时它与近邻构成的 $+1-+1$ 键在变化后可以成为 $0-0, -1-0, 0--1, -1--1$ 四种情形. 用 a_{i1}, a_{i2}, a_{i3} 和 a_{i4} 分别表示相应于这四种变化键的数目, 显然有

$$a_{i1} + a_{i2} + a_{i3} + a_{i4} = a_i. \quad (\text{A.1})$$

而基态时 $+1--1$ 的键变化后就可以成为 $0-0, -1-0, 0-+1, -1-+1$ 四种情形. 用 b_{i1}, b_{i2}, b_{i3} 和 b_{i4} 分别表示相应于这四种变化键的数目, 也有

$$b_{i1} + b_{i2} + b_{i3} + b_{i4} = b_i. \quad (\text{A.2})$$

如第 i 个自旋为 -1 , 则将上面各种情形的键两端自旋 $+1$ 换成 $-1, -1$ 换成 $+1, 0$ 不动. a_{i1} 和 b_{i1} 等仍相应地按次序表示四种情况.

由于

$$\sum_{i=1}^{n^0} a_{i3} = \sum_{i=1}^{n^\pm} a_{i2} \text{ 和 } \sum_{i=1}^{n^0} b_{i3} = \sum_{i=1}^{n^\pm} b_{i2},$$

注意避免计算上的重复, 可得集团内键的变化对 ΔE 的贡献为

$$\sum_{i=1}^{n^0} \left(\frac{-a_{i1}}{2} - a_{i3} + \frac{b_{i1}}{2} + b_{i3} \right) J, \quad (\text{A.3})$$

$n^0, n^\pm$ 在正文第二节中已有定义.

集团在基态时内部的第 i 个自旋有 $4-a_i$ 个与之相同的近邻和 $8-b_i$ 个与之相异的近邻在集团外部. 集团位形变化时这些外部近邻的自旋取值不变, 但与第 i 个自旋相连的键的情况发生了变化. 这种变化对能量 ΔE 的贡献为

$$\sum_{i=1}^{n^0} [(8-b_i)J - (4-a_i)J] + \sum_{i=1}^{n^\pm} 2[(8-b_i)J - (4-a_i)J]. \quad (\text{A.4})$$

在次格子上分别加外场 H_α 和 H_β 后, 集团位形变化使自旋在场中的能量变化为

$$H_\alpha(n_+^0 + 2n_+^\pm) - H_\beta(n_-^0 + 2n_-^\pm), \quad (\text{A.5})$$

$n_+^0, n_+^\pm, n_-^0$ 和 $n_-^\pm$ 也在正文中定义了.

又由诸 $a_{i1}, a_{i2}, \dots$ 和 $b_{i1}, \dots$ 等代表的意义可有下列各式成立:

$$\sum_{i=1}^{n^0} a_{i2} = \sum_{i=1}^{n^0} a_{i4} = \sum_{i=1}^{n^0} b_{i2} = \sum_{i=1}^{n^0} b_{i4} = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$\sum_{i=1}^{n^\pm} a_{i1} = \sum_{i=1}^{n^\pm} a_{i3} = \sum_{i=1}^{n^\pm} b_{i1} = \sum_{i=1}^{n^\pm} b_{i3} = 0. \quad (\text{A.7})$$

所求 ΔE 为 (A.3), (A.4) 和 (A.5) 式之和, 同时注意 (A.1), (A.2), (A.6) 和 (A.7) 式就有

$$\begin{aligned} \Delta E &= 4n^0 J + 8n^\pm J + \sum_{i=1}^{n^0} \frac{a_{i1} - b_{i1}}{2} J + 2 \sum_{i=1}^{n^\pm} (a_{i2} - b_{i2}) J \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^{n^\pm} (a_{i4} - b_{i4}) J + H_\alpha(n_+^0 + 2n_+^\pm) - H_\beta(n_-^0 + 2n_-^\pm) \\ &= 4n^0 J + 8n^\pm J + \delta_0 J + 2\delta_1 J + 4\delta_2 J + H_\alpha(n_+^0 + 2n_+^\pm) \\ &\quad - H_\beta(n_-^0 + 2n_-^\pm). \end{aligned}$$

δ_0, δ_1 和 δ_2 意义见正文说明.

参 考 文 献

- [1] 刘志明、张富春、徐文兰、李荫远, 物理学报, **30**(1981), 747.
- [2] C. Domb, Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 3, Chap. 6, C. Domb and M. S. Green (ed), (1974).
- [3] C. Domb, M. F. Sykes, *Proc. Roy. Soc.*, **A240**(1957), 244.
- [4] R. Tahir-kheli, *Phys. Rev.*, **169**(1968), 517.
- [5] M. Blume, V. J. Emery, R. B. Griffiths, *Phys. Rev. A*, **4**(1971), 1071.
- [6] J. C. Wheeler and J. A. Gualtieri, *Phys. Rev. B*, **20**(1979), 2014.

STATISTICAL THEORY OF $I(1)$ MODEL ANTIFERROMAGNETISM ON A FACE CENTERED CUBIC LATTICE WITH NEAREST-NEIGHBOR INTERACTION —A SERIES EXPANSION METHOD

XU WEN-LAN¹⁾ LI YIN-YUAN (Y. Y. Li)

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The antiferromagnetism of Ising spin $I(1)$ with the nearest neighbor interaction $-J$ on fcc has been treated by the method of series expansion similar to [1]. The free energy function for the lower temperature ordered state is written in a series of $\exp(-J/kT)$ and that for the higher temperature disorder state in a series of J/kT . Using the Padé approximants we have shown clearly that the free energy curves of the two states cross at $T_c = 1.33 J/k$. The transition is one of the first order, the same conclusion as we obtained for the $I(1/2)$ model, but T_c of $I(1)$ is lower than that of $I(1/2)$. The thermodynamic quantities such as the long-range and short-range order parameter, the internal energy, the entropy, the specific heat as well as the magnetic susceptibility were calculated in variation with temperature. They all change abruptly at T_c . We concluded that (1) on fcc the Ising spin AM-PM transtion being one of the first order should be attributed to the close-packing characteristics of this lattice; and (2) $T_c(s)$ decreases as s increases.

1) Graduate student, Peking Graduate School, University of Science and Technology of China.

Brown 方程的分歧解与初始成畴问题

李 伯 臧 蒲 富 恪

(中国科学院物理研究所)

1981 年 4 月 13 日收到

提 要

初始成畴问题是一个典型的分歧问题。通过标度变换使铁磁体的尺寸参数显现在自由能表达式和 Brown 方程中。推广应用分歧理论的微扰法,求出了 Brown 方程的最小正分歧点和从此点发出的分歧解。分析了单畴态和分歧解的稳定性,据此对初始成畴临界尺寸和初始成畴行为进行了研究。结论指出,临界尺寸是尺寸参数的最小正分歧点,其近旁的初始成畴过程或者沿着分歧解连续地进行,或者是一个不连续的跃变。给出了相应的判据。此外,还得到了严格单畴临界尺寸上下限的一个估计,以及在特殊情况下这种临界尺寸的精确结果。

一、问题的提出

铁磁体当尺寸小到某种程度以后,将变成单畴粒子,即其磁化矢量的稳定分布是均匀的。这种观点首先由 Френкель 和 Дорфман 于 1930 年提出,不久后就得到一系列实验的支持。Kittel, Néel, Stoner 和 Wohlfarth 等通过比较单畴态和某些非单畴态的自由能以及 Кондорский 采用 Rietz 近似法,对单畴临界尺寸(实际上是其上界)做过估计^[1]。特别是 Brown^[2] 根据微磁学观点,不但估计了上界,而且估计了下界;他所研究的是单轴各向异性的球状铁磁体,且各向异性常数为正。

以上诸人所讨论的单畴临界尺寸,是铁磁体保持单畴态为自由能最小状态的最大尺寸,不少文献将它称作“严格单畴临界尺寸”。还有人^[2-4]将反磁化形核模式保持为一致转动模式的最大尺寸(我们曾把它叫做分界尺寸^[5])不恰当地称为“实用单畴临界尺寸”。

本文将考察在铁磁体的自由生长过程中,或者当磁化态被局限于剩磁状态时,随着铁磁体尺寸的增大,磁化态对单畴态的初始偏离问题。当铁磁体的尺寸足够小时,由于其中能垒很小,故其平衡态应是自由能处于最小值的状态。随着尺寸的增大,其平衡态只需对应于自由能的某个极小值即可。

我们问:在这一类情况中,随着铁磁体尺寸的增大,平衡磁化状态在什么尺寸下开始由单畴态转变成非均匀态? 这种转变的行为如何?

我们将这些问题统称为初始成畴问题,并把这种转变的临界尺寸称为初始成畴临界尺寸。在不致引起误解时,简称为临界尺寸。

与反磁化形核问题一样^[5],初始成畴问题显然也是一个典型的分歧问题^[6],而且适于通过推广应用非线性泛函分析中的微扰法^[7],去求解以铁磁体尺寸为参数的 Brown 方程

的最小正分歧点和从此点发出的分歧解而得到解决。

在自由能和 Brown 方程的普通表述中, 尺寸参数分别隐含于积分限和边界条件里, 不便于用来进行分歧计算。为此我们引入一个标度变换, 使尺寸参数明显地呈现出来。

在分析了单畴态和分歧解的稳定性之后, 我们得到结论: 临界尺寸是尺寸参数的最小正分歧点, 而其近旁的初始成畴行为或者沿分歧解连续地进行, 或者是一个不连续跳跃。我们给出了连续和不连续转变的判据。

此外, 从本文的结果, 附带地得到了严格单畴临界尺寸上、下限的一个估计; 在特殊情况下, 还得到了这种单畴临界尺寸的精确结果。

二、标度变换后自由能和 Brown 方程的表述

根据微磁学^[8], 当略去表面能的各向异性和磁弹性能时, 具有立方或理想密排六方晶格的单晶铁磁体的自由能和 Brown 方程分别为

$$E = \int_{\mathcal{D}} \left\{ \frac{1}{2} C [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2 + (\nabla \gamma)^2] + G(\mathbf{u}) - \frac{1}{2} M_s \mathbf{H}_d \cdot \mathbf{u} - M_s \mathbf{H}_e \cdot \mathbf{u} \right\} d\rho \quad (1)$$

和

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \times [C \nabla^2 \mathbf{u} - \partial G / \partial \mathbf{u} + M_s (\mathbf{H}_d + \mathbf{H}_e)] &= 0 \quad \rho \in \mathcal{D}, \\ \mathbf{u} \times \partial \mathbf{u} / \partial n &= 0 \quad \rho \in \partial \mathcal{D}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\mathcal{D}, \partial \mathcal{D}$, C , M_s , $G(\mathbf{u})$, $\mathbf{H}_d$, $\mathbf{H}_e$ 和 ρ 分别是铁磁体所占空间区域, 其边界, 交换常数, 饱和磁化强度, 磁各向异性能密度, 退磁场, 外磁场和矢径。单位矢量场 $\mathbf{u} = \alpha \mathbf{i} + \beta \mathbf{j} + \gamma \mathbf{k}$ 是约化磁化矢量, $u^2 = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$ 。此处 $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ 和 $\mathbf{k}$ 分别是笛卡尔坐标系的三个坐标轴上的单位矢量。 $\partial / \partial n$ 表示沿 $\partial \mathcal{D}$ 上外法矢 $\mathbf{n}$ 方向的微商, 磁化矢量在铁磁体中的平衡分布应是上述非线性的 Brown 方程的稳定解。

为了使隐含于(1)式的积分限和(2)式的边界条件中的尺寸参数明显地呈现出来, 引入标度变换

$$\mathbf{r} = \rho / R, \quad (3)$$

式中 R 为铁磁体上某个选定的有限尺寸。

将经受变换(3)式的 $\mathcal{D}$ 和 $\partial \mathcal{D}$ 分别记为 D 和 ∂D 。当保持铁磁体的形状不变而仅改变 R 时, $\mathcal{D}$ 和 $\partial \mathcal{D}$ 仅作相似变换, 而 D 和 ∂D 却保持固定。仍将 $\partial / \partial \mathbf{r}$ 和 $\mathbf{u}(R\mathbf{r})$ 等分别记为 ∇ 和 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r})$ 等。此外, 还引入下列约化量:

$$F = \frac{E}{CR}, \quad g = \frac{G}{C}, \quad \mathbf{h} = \frac{M_s}{C} \mathbf{H}_d, \quad \mathbf{H} = \frac{M_s}{C} \mathbf{H}_e. \quad (4)$$

利用(3)和(4)式, 可将(1)和(2)式分别改写成

$$F = \int_D \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2 + (\nabla \gamma)^2] + S \left[g(\mathbf{u}) - \frac{1}{2} \mathbf{h} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{H} \cdot \mathbf{u} \right] \right\} d\mathbf{r} \quad (5)$$

和

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \times [\nabla^2 \mathbf{u} - S(\partial g / \partial \mathbf{u} - \mathbf{h} - \mathbf{H})] &= 0 \quad \mathbf{r} \in D, \\ \mathbf{u} \times \partial \mathbf{u} / \partial n &= 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D, \end{aligned} \quad (6)$$

式中

$$S = R^2. \quad (7)$$

不难证明,作为 $\mathbf{u}$ 的线性算子的 $\mathbf{h} = \mathbf{h}[\cdot]$ 的表达式并不因变换(3)式而改变:

$$\mathbf{h}[\mathbf{u}] = \frac{M_s^2}{C} \left\{ \int_D \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} \nabla' \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \oint_{\partial D} \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} \mathbf{u}(\mathbf{r}') \cdot d\boldsymbol{\sigma}' \right\}. \quad (8)$$

由于 $\mathbf{u}^2 = 1$, 故 Brown 方程中只有两个分量方程是独立的. 比如当 $\mathbf{r} \approx 0$ 时, 我们可将三维矢量方程(6)简化成二维矢量方程:

$$\begin{aligned} [\nabla^2 \gamma - S(\partial g / \partial \gamma - h_s - H_s)] \bar{\mathbf{u}} - \gamma [\nabla^2 \bar{\mathbf{u}} - S(\partial g / \partial \bar{\mathbf{u}} - \bar{h} - \bar{H})] &= 0 \quad \mathbf{r} \in D, \\ \partial \bar{\mathbf{u}} / \partial n &= 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D, \end{aligned} \quad (9)$$

式中

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}} &= \alpha \mathbf{i} + \beta \mathbf{j}, \quad \bar{h} = h_x \mathbf{i} + h_y \mathbf{j}, \\ \gamma^2 &= 1 - \bar{\mathbf{u}}^2, \quad \bar{H} = H_x \mathbf{i} + H_y \mathbf{j}. \end{aligned} \quad (10)$$

在方程(9)中,边界条件已是线性的,其证明见文献[5].

(5)和(6)或(9)式,便分别是我们所要求的、显含尺寸参数的自由能表达式和 Brown 方程.

为了简化计算,除了假定

1) 铁磁体是具有立方或理想密排六方晶格的单晶体;忽略表面能的各向异性和磁弹性能以外,我们还进一步假设:

2) 铁磁体是具有单轴磁各向异性的旋转椭球或具有立方磁各向异性的长椭球;二者都包括无穷长圆柱和球作为特例;将旋转半径 R 取作尺寸参数.

3) 笛卡儿坐标系的原点和 z 轴分别与 D 的中心和旋转对称轴重合;各向异性轴的取向满足

$$g(\mathbf{u}) = k_1(\alpha^2 + \beta^2) + k_2(\alpha^4 + \alpha^2\beta^2 + \beta^4), \quad (11)$$

式中系数 k_1 和 k_2 与普通各向异性常数 K 或 K_1 的关系列于表 1.

$$4) \quad 2k_1 + n_T - n_z > 0, \quad (12)$$

式中

$$n_T = N_T M_s^2 / C, \quad n_z = N_z M_s^2 / C. \quad (13)$$

而 N_T 和 N_z 分别是垂直和平行于铁磁体旋转对称轴方向的退磁因子.

表 1

磁各向异性	k_1	k_2
单轴型	K/C	0
立方型	K_1/C	$-K_1/C$

此外应注意,在初始成畴问题(和单畴问题)中,外磁场是不出现的: $\mathbf{H} = 0$.

我们将满足以上假定的情况简称为对称情况. 在对称情况下,无论 R 取何值,沿 z 轴的均匀磁化态 $\mathbf{u} = \pm \mathbf{k}$ 都是 Brown 方程的解,而且在所有均匀磁化态中,只有这两个状

态的自由能处于最小值. 我们在第四节第一段中将证明, 当 R 足够小时, 它们还是全部磁化态(均匀和不均匀)中自由能最小的. 显然 $\mathbf{u} = \mathbf{k}$ 与 $\mathbf{u} = -\mathbf{k}$ 是两个彼此等价的状态, 因此只须把

$$\mathbf{u} = \mathbf{k} \quad (14)$$

取作分歧计算的参考解, 并特别地称之为单畴态.

三、Brown 方程的解的初始分歧

本节中推广应用分歧理论中的微扰法^[7]来求以 S 为参数的 Brown 方程相对于参考解 (14) 式的最小正分歧点 $S_c = R^2$ 和从此点发出的分歧解 (在 R^2 近旁). 因为这种分歧解只涉及对单畴态的初始偏离, 故

$$r = \sqrt{1 - \bar{u}^2} > 0. \quad (15)$$

所以此时采用二维矢量形式的 Brown 方程(9)是合适的.

将(11)和(15)式代入(9)式, 则 Brown 方程成为

$$\begin{aligned} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + S(\bar{\mathbf{h}}[\bar{\mathbf{u}}] - T\bar{\mathbf{u}}) - \bar{\Psi}[S, \bar{\mathbf{u}}] &= 0 \quad \mathbf{r} \in D, \\ \partial \bar{\mathbf{u}} / \partial n &= 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D, \end{aligned} \quad (16)$$

式中

$$T = 2k_1 - n_z, \quad (17)$$

而 $\bar{\mathbf{u}}$ 的非线性算子 $\bar{\Psi}[S, \cdot]$ 由下式表述:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}[S, \bar{\mathbf{u}}] &= (1 - \sqrt{1 - \bar{u}^2}) \{ \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + S(\bar{\mathbf{h}}[\bar{\mathbf{u}}] - 2k_1 \bar{\mathbf{u}}) \} \\ &\quad + \{ \nabla^2 \sqrt{1 - \bar{u}^2} + S h_x [\bar{\mathbf{u}} + (\sqrt{1 - \bar{u}^2} - 1)\mathbf{k}] \} \bar{\mathbf{u}} \\ &\quad + S \sqrt{1 - \bar{u}^2} \{ \bar{\mathbf{h}}[(1 - \sqrt{1 - \bar{u}^2})\mathbf{k}] \\ &\quad + 2k_2 [\alpha(2\alpha^2 + \beta^2)\mathbf{i} + \beta(\alpha^2 + 2\beta^2)\mathbf{j}] \}. \end{aligned} \quad (18)$$

将分歧解写成参数形式:

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, \lambda), \quad S = S(\lambda), \quad (19)$$

它们满足

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, 0) = 0, \quad S(0) = S_c. \quad (20)$$

将(19)式代入方程(16), 两端对 λ 取各阶微商, 然后令 $\lambda = 0$. 利用(20)式, 便得到一个递推线性方程系列(这里只写出前三个):

$$\begin{aligned} \nabla^2 \dot{\bar{\mathbf{u}}} + S_c(\dot{\bar{\mathbf{h}}}[\dot{\bar{\mathbf{u}}}] - T\dot{\bar{\mathbf{u}}}) &= 0 \quad \mathbf{r} \in D, \\ \partial \dot{\bar{\mathbf{u}}} / \partial n &= 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D; \end{aligned} \quad (21a)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \ddot{\bar{\mathbf{u}}} + S_c(\ddot{\bar{\mathbf{h}}}[\ddot{\bar{\mathbf{u}}}] - T\ddot{\bar{\mathbf{u}}}) &= -2 \left\{ \dot{S}(\dot{\bar{\mathbf{h}}}[\dot{\bar{\mathbf{u}}}] - T\dot{\bar{\mathbf{u}}}) \right. \\ &\quad \left. + S_c \left(h_x[\dot{\bar{\mathbf{u}}}] \dot{\bar{\mathbf{u}}} + \frac{1}{2} \dot{\bar{\mathbf{h}}}[\dot{\bar{\mathbf{u}}}^2 \mathbf{k}] \right) \right\} \quad \mathbf{r} \in D, \\ \partial \ddot{\bar{\mathbf{u}}} / \partial n &= 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D; \end{aligned} \quad (21b)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \ddot{\bar{\mathbf{u}}} + S_c(\ddot{\bar{\mathbf{h}}}[\ddot{\bar{\mathbf{u}}}] - T\ddot{\bar{\mathbf{u}}}) &= -3 \{ \ddot{S}(\ddot{\bar{\mathbf{h}}}[\ddot{\bar{\mathbf{u}}}] - T\ddot{\bar{\mathbf{u}}}) \\ &\quad + \dot{S}(\dot{\bar{\mathbf{h}}}[\ddot{\bar{\mathbf{u}}}] - \dot{\bar{\mathbf{h}}}[\dot{\bar{\mathbf{u}}}^2 \mathbf{k}] - 2h_x[\dot{\bar{\mathbf{u}}}] \dot{\bar{\mathbf{u}}} - T\ddot{\bar{\mathbf{u}}}) \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + S_c [n_z \ddot{u}^2 \dot{u} - h_z [\ddot{u}] \dot{u} + h_z [\ddot{u}^2 \mathbf{k}] \dot{u} \\
& - h_z [\dot{u}] \ddot{u} - \bar{h} [\dot{u} \cdot \ddot{u} \mathbf{k}] - 4k_2 \dot{\alpha} \dot{\beta} (\dot{\beta}^2 \mathbf{i} + \dot{\alpha} \mathbf{j}) \\
& - 8k_2 (\dot{\alpha}^3 \mathbf{i} + \dot{\beta}^3 \mathbf{j})] + \dot{u} \nabla^2 \dot{u}^2 \} \quad \mathbf{r} \in D, \\
& \partial \ddot{u} / \partial n = 0 \quad \mathbf{r} \in \partial D;
\end{aligned} \tag{21c}$$

式中

$$\begin{aligned}
\dot{u} &= [\partial \bar{u}(r, \lambda) / \partial \lambda]_{\lambda=0}, \quad \ddot{u} = [\partial^2 \bar{u}(r, \lambda) / \partial \lambda^2]_{\lambda=0}, \dots \\
\dot{S} &= [dS(\lambda) / d\lambda]_{\lambda=0}, \quad \ddot{S} = [d^2 S(\lambda) / d\lambda^2]_{\lambda=0}, \dots
\end{aligned} \tag{22}$$

由方程 (21a) 和变分法, 知

$$S_c = R_c^2 = \inf_{\Lambda > 0} \frac{\int_D [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2] d\mathbf{r}}{-T \int_D \bar{u}^2 d\mathbf{r} + \int_D \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u} d\mathbf{r}}. \tag{23}$$

此处

$$\Lambda = -T \int_D \bar{u}^2 d\mathbf{r} + \int_D \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u} d\mathbf{r}. \tag{24}$$

因为 $\int_D \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u} d\mathbf{r} \leq 0^{[9]}$, 所以有

$$R_c = \infty, \quad 2k_1 - n_z = T \geq 0. \tag{25}$$

因此以下总假设

$$T = 2k_1 - n_z < 0. \tag{26}$$

应当指出, 当 D 为无穷大平板时, 条件 (12) 和 (26) 式是互相矛盾的, 因此本文不讨论 D 为无穷大平板的情形.

按照我们在研究反磁化形核问题^[5]时所用的推理方法和计算程序, 知

$$\dot{S} = 0. \tag{27}$$

再注意到在条件 (12) 式下, 方程 (21a) 没有 $\dot{u} = \text{const} \neq 0$ 的解, 则易于求得 S_c 及从 S_c 发出的分歧解 (在 $R = R_c$ 近旁):

$$\begin{aligned}
S_c &= \kappa_1^2 / (n_z - 2k_1), \quad R_c = \kappa_1 / \sqrt{n_z - 2k_1}, \\
\bar{u}(r, R) &= \pm (n_z - 2k_1) D_2 \sqrt{R^2 - R_c^2} \bar{u}_0,
\end{aligned} \tag{28}$$

式中

$$D_2 = \sqrt{2/\ddot{S}_0}, \quad \ddot{S}_0 = (2k_1 - n_z)^2 \ddot{S}, \tag{29}$$

而

$$\bar{u}_0 = \begin{cases} J_1(\mu_1 \xi) (-\mathbf{i} \sin \phi + \mathbf{j} \cos \phi) & \text{无穷长圆柱;} \\ j_1(\nu_1 \xi) \sin \eta (-\mathbf{i} \sin \phi + \mathbf{j} \cos \phi) & \text{球;} \\ P_{S_1^1}(\xi, e^2 \tau_1^2) P_{S_1^1}(\cos \eta, e^2 \tau_1^2) (-\mathbf{i} \sin \phi + \mathbf{j} \cos \phi) & \text{长椭球;} \\ P_{S_1^1}(i\xi, -e^2 \delta_1^2) P_{S_1^1}(\cos \eta, -e^2 \delta_1^2) (-\mathbf{i} \sin \phi + \mathbf{j} \cos \phi) & \text{扁椭球.} \end{cases} \tag{30}$$

对于无穷长圆柱, 球, 长椭球和扁椭球, κ_1 分别是方程

$$\begin{aligned}
dJ_1(\mu)/d\mu &= 0, \quad dj_1(\nu)/d\nu = 0, \\
[\partial P_{S_1^1}(t, e^2 \tau^2) / \partial t]_{t=\sqrt{e^2 \tau^2 - 1}} &= 0, \\
[\partial P_{S_1^1}(it, -e^2 \delta^2) / \partial t]_{t=\sqrt{e^2 \delta^2 - 1}} &= 0
\end{aligned} \tag{31}$$

中宗量 μ, ν, τ 和 δ 的第一个正根, 其相应值分别为 $\mu_1 \approx 1.84, \nu_1 \approx 2.08, \tau_1 = \tau_1(e)$ 和 $\delta_1 = \delta_1(e)$. 后二者与 D 的半焦距 (即 $\mathcal{D}$ 的半焦比) e 有关. $J_1(\cdot)$ 和 $j_1(\cdot)$ 以及 $P_{11}^1(\cdot, \cdot)$ 分别是第一类一阶柱和球 Bessel 函数以及第一类 $(1, 1)$ 阶球体波函数^[10]. (ξ, η, ϕ) 是曲线坐标, 其中 ϕ 为方位角. 它们与笛卡儿坐标 x, y 和 z 的关系列于表 2.

表 2

无穷长圆柱	球	长 椭 球	扁 椭 球
$x = \xi \cos \phi$	$x = \xi \sin \eta \cos \phi$	$x = e\sqrt{\xi^2 - 1} \sin \eta \cos \phi$	$x = e\sqrt{\xi^2 + 1} \sin \eta \cos \phi$
$y = \xi \sin \phi$	$y = \xi \sin \eta \sin \phi$	$y = e\sqrt{\xi^2 - 1} \sin \eta \sin \phi$	$y = e\sqrt{\xi^2 + 1} \sin \eta \sin \phi$
$z = \eta$	$z = \xi \cos \eta$	$z = e\xi \cos \eta$	$z = e\xi \cos \eta$

由(30)式可见, 分歧解都是属于“涡旋模式”的. 将 $\bar{u}_0$ 统一写成下列形式:

$$\bar{u}_0 = A_1(\xi)B_1(\eta)(-i \sin \phi + j \cos \phi), \quad (32)$$

则有

$$\begin{aligned} \bar{S}_0 = & \kappa_1^2 \left(\int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) p(\xi, \eta) d\xi d\eta \right)^{-1} \\ & \times \left\{ (7k_1 - n_z) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^4(\xi) B_1^4(\eta) p(\xi, \eta) d\xi d\eta \right. \\ & - (1/S_c) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) \nabla^2 [A_1^2(\xi) B_1^2(\eta)] p(\xi, \eta) d\xi d\eta \\ & \left. - \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) \Gamma [A_1^2(\xi) B_1^2(\eta)] p(\xi, \eta) d\xi d\eta \right\}, \quad (33) \end{aligned}$$

式中 $A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) = \bar{u}_0^2$, 而

$$\Gamma[\bar{u}_0^2] = h_x[\bar{u}_0^2 k] - h_x[\bar{u}_1]. \quad (34)$$

这里 $\bar{u}_1$ 是将方程(27b)右端的 $\bar{u}$ 换成 $\bar{u}_0$ 后 $\bar{u}$ 的解. 而

$$p(\xi, \eta) = \begin{cases} \xi & \text{无穷长圆柱;} \\ \xi^2 \sin \eta & \text{球;} \\ e^3(\xi^2 - \cos^2 \eta) \sin \eta & \text{长椭球;} \\ e^3(\xi^2 + \cos^2 \eta) \sin \eta & \text{扁椭球.} \end{cases} \quad (35)$$

相应的 ξ_0 分别为 $1, 1, \sqrt{e^{-2} + 1}, \sqrt{e^{-2} - 1}$.

当 D 为无穷长圆柱时, $\Gamma[\bar{u}_0^2] = 0, n_z = 0$, 故

$$\bar{S}_0 = \begin{cases} -1.18k_1 > 0 & \text{单轴各向异性;} \\ -8.23k_1 > 0 & \text{立方各向异性.} \end{cases} \quad (36)$$

式中的不等号来源于条件(26)式.

对于球, 长椭球和扁椭球, 由于 $\Gamma[\bar{u}_0^2]$ 难以计算, 故采用下列估计^[5]:

$$-(4\pi M_i^2/C) \int_D \bar{u}_0^4 d\mathbf{r} < \int_D \Gamma[\bar{u}_0^2] \bar{u}_0^2 d\mathbf{r} < 0. \quad (37)$$

若令

$$\bar{S}_1 = \left(\int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) p(\xi, \eta) d\xi d\eta \right)^{-1}$$

$$\times \left\{ \kappa_1^2(7k_2 - n_z) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^1(\xi) B_1^1(\eta) \rho(\xi, \eta) d\xi d\eta \right. \\ \left. + (2k_1 - n_z) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) \nabla^2 [A_1^2(\xi) B_1^2(\eta)] \rho(\xi, \eta) d\xi d\eta \right\}, \quad (38a)$$

$$\ddot{S}_2 = \left(\int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) \rho(\xi, \eta) d\xi d\eta \right)^{-1} \\ \times \left\{ \kappa_1^2(7k_2 + 4\pi M_s^2/C - n_z) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^1(\xi) B_1^1(\eta) \rho(\xi, \eta) d\xi d\eta \right. \\ \left. + (2k_1 - n_z) \int_0^{\xi_0} \int_0^\pi A_1^2(\xi) B_1^2(\eta) \nabla^2 [A_1^2(\xi) B_1^2(\eta)] \rho(\xi, \eta) d\xi d\eta \right\}, \quad (38b)$$

则有

$$\ddot{S}_1 < \ddot{S}_0 < \ddot{S}_2. \quad (39)$$

特别是对于球, $n_z = 4\pi M_s^2/3C$, 故

$$\begin{cases} \ddot{S}_1 = -(0.81k_1 + 0.17n_z) < 0, \quad \ddot{S}_2 = -0.81k_1 + 1.55n_z > 0, \\ \text{单轴各向异性;} \\ \ddot{S}_1 = -(4.80k_1 + 0.17n_z) < 0, \quad \ddot{S}_2 = -4.80k_1 + 1.55n_z \\ \text{立方各向异性.} \end{cases} \quad (40)$$

$\ddot{S}_1$ 和 $\ddot{S}_2$ 中的不等号分别来源于条件 (12) 和 (26) 式。

有物理意义的解必须是实的, 因此由 (28) 和 (29) 式可见: 当 $\ddot{S}_0 > 0$ 时, 分歧解倾向 R_c 的高侧; 当 $\ddot{S}_0 < 0$ 时, 分歧解倾向 R_c 的低侧。如果 $\ddot{S}_0$ 难以精确计算, 则由 (39) 式可以给出关于分歧解倾向的充分条件: $\ddot{S}_1 > 0$ ($\ddot{S}_2 < 0$) 时, 分歧解倾向 R_c 的高(低)侧。

由 (36) 和 (40) 式可知, 在对称情况下, 无穷长圆柱状铁磁体的分歧解倾向 R_c 的高侧; 立方各向异性的球状铁磁体的分歧解, 当 $1.35 M_s^2 < K_1 < 2.09 M_s^2$ 时倾向 R_c 的低侧。

表 3

材料	原始数据(室温下) ^[11]					球			无穷长圆柱		
	晶体结构	磁各向异性(近似)	K_1 或 K (10^6 尔格/厘米 ³)	M_s (高斯)	C (10^{-6} 尔格/厘米)	R_0 (埃)	R_a (埃)	R_c (埃)	R_0 (埃)	R_a (埃)	R_c (埃)
Fe	体心立方	立方型	0.48	1710	4.0	119	119	124	86	∞	∞
Co	理想密排六方	单轴型	5.3	1431	2.6	115	115	∞	83	∞	∞
Ni	面心立方	立方型	-0.045	485	1.7	273	258*	262*	197	800	800

* 对于 Ni 球, 条件 (12) 式不被满足。此处的 R_c 虽然也是用 (28) 式计算的, 但应按 § 7.2 的意义来理解; 至于 R_a (见 § 4.1), 是按 $\min_{(u^2)=1} F_l[u] = F[(i+j+k)/\sqrt{3}]$ 求得的 R , 因为这时 $u = (i+j+k)/\sqrt{3}$ 在均匀态中是自由能最小的。

在几种特殊情形下的 R_c 的计算值列于表 3。表 3 中还列出了 R_a (见第四节第 1 段) 和 R_0 (分界尺寸^[9]) 的计算值, 以资比较。

在立方或单轴各向异性的无穷长圆柱状铁磁体中, 当立方轴或单轴平行于柱轴并且 K_1 或 K 为正时, 无论半径多大, 磁化矢量平行于柱轴一个方向的均匀磁化态显然都对应于自由能的最小值, 因此单畴临界尺寸应为无穷大, 这与我们的计算结果相符合。表 3 中的其它计算值也与实验结果^[1]和其他人的估计值^[1-4,8]一致。由于迄今所见到的实验值都

不是准确的测量结果,而且在计算中要用到的交换常数也难于准确得到,所以更精确的理论与实验的比较是困难的.

四、单畴态和分歧解的稳定性

1. 单畴态的绝对稳定性

仿照 Brown^[2], 容易得到

$$[n_T(\langle \alpha \rangle^2 + \langle \beta \rangle^2) + n_Z \langle \gamma \rangle^2]v \leq - \int_D \mathbf{h}[\mathbf{u}] \cdot \mathbf{u} d\mathbf{r}, \quad (41)$$

式中 $\langle \rangle$ 表示在 D 上的体平均, v 是 D 的体积. Brown 的相应结果是当 D 为球即 $n_T = n_Z = 4\pi M^2/3C$ 时(41)式的特例.

定义

$$F_I[\mathbf{u}] = \begin{cases} \int_D \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2 + (\nabla \gamma)^2] + S k_1 (\alpha^2 + \beta^2) \right\} d\mathbf{r} \\ \quad + \frac{1}{2} S v [n_T(\langle \alpha \rangle^2 + \langle \beta \rangle^2) + n_Z \langle \gamma \rangle^2] \quad \text{单轴各向异性} \\ \quad \text{及 } k_1 \leq 0 \text{ 时的立方各向异性;} \\ \int_D \frac{1}{2} [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2 + (\nabla \gamma)^2] d\mathbf{r} + \frac{1}{2} S v [n_T(\langle \alpha \rangle^2 + \langle \beta \rangle^2) \\ \quad + n_Z \langle \gamma \rangle^2] \quad k_1 \geq 0 \text{ 时的立方各向异性,} \end{cases} \quad (42)$$

则由(5),(11)和(41)式得到

$$F_I[\mathbf{u}] \leq F[\mathbf{u}]. \quad (43)$$

这里 $F[\mathbf{u}]$ 是磁化态为 $\mathbf{u}$ 时的自由能.

因为条件 $\langle \mathbf{u}^2 \rangle = 1$ 弱于条件 $\mathbf{u}^2 = 1$, 所以

$$\min_{\langle \mathbf{u}^2 \rangle = 1} F_I[\mathbf{u}] \leq \min_{\mathbf{u}^2 = 1} F_I[\mathbf{u}] \leq \min_{\mathbf{u}^2 = 1} F[\mathbf{u}]. \quad (44)$$

考虑到条件(12)式和立方各向异性时 $n_T \geq n_Z$ 的假设,采用与 Brown^[2] 相似的计算步骤,可按条件 $\min_{\langle \mathbf{u}^2 \rangle = 1} F_I[\mathbf{u}] = F[\mathbf{k}]$ 求得一个尺寸 $R = R_s > 0$:

$$R_s = \begin{cases} \kappa_1 / \sqrt{n_Z} & k_1 \geq 0, \\ \kappa_1 / \sqrt{n_Z - 2k_1} & k_1 \leq 0. \end{cases} \quad (45)$$

因有

$$F[\mathbf{k}] \leq \min_{\mathbf{u}^2 = 1} F[\mathbf{u}] \quad R \leq R_s, \quad (46)$$

亦即当旋径 $R \leq R_s$ 时,单畴态 $\mathbf{u} = \mathbf{k}$ (或 $-\mathbf{k}$) 的自由能处于最小值. 几种特殊情形下的 R_s 的计算值列于表 3.

2. 单畴态的稳定性

通过直接计算得到

$$\dot{F} = [\partial F[t\bar{\mathbf{u}} + \sqrt{1-t^2}\mathbf{k}]/\partial t]_{t=0} = 0, \quad (47a)$$

$$\begin{aligned}\ddot{F} &= [\partial^2 F[t\bar{u} + \sqrt{1 - t^2 \bar{u}^2} \mathbf{k}] / \partial t^2]_{t=0} \\ &= \int_D \{(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2 + S[(2k_1 - n_z)\bar{u}^2 - \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u}]\} d\mathbf{r}. \quad (47b)\end{aligned}$$

因此当 $2k_1 - n_z \geq 0$ 时, 对任何 $\bar{u} \neq 0$, 总有 $\ddot{F} > 0$, 这与此时的 $R_c = \infty$ 是相对应的; 当 $2k_1 - n_z < 0$ 时, 对那些满足 $\Lambda = \int_D [(n_z - 2k_1)\bar{u}^2 + \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u}] d\mathbf{r} < 0$ 的 $\bar{u}$, 也有 $\ddot{F} > 0$.

当 $2k_1 - n_z < 0$ 且 $\Lambda > 0$ 时(使 $\Lambda > 0$ 的 $\bar{u} \neq 0$ 显然是存在的), 利用 (23) 式将 (47b) 式改写成

$$\begin{aligned}\ddot{F} &= \left[\frac{\int_D [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2] d\mathbf{r}}{(n_z - 2k_1) \int_D \bar{u}^2 d\mathbf{r} + \int_D \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u} d\mathbf{r}} \right. \\ &\quad \left. - \min_{\Lambda > 0} \frac{\int_D [(\nabla \alpha)^2 + (\nabla \beta)^2] d\mathbf{r}}{(n_z - 2k_1) \int_D \bar{u}^2 d\mathbf{r} + \int_D \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u} d\mathbf{r}} \right] \\ &\quad + (S_c - S) \int_D [(n_z - 2k_1)\bar{u}^2 + \bar{h}[\bar{u}] \cdot \bar{u}] d\mathbf{r}. \quad (48)\end{aligned}$$

可见当 $R < R_c$ 时, $\ddot{F} > 0$; 当 $R > R_c$ 时, 取 $\bar{u} = \bar{u}_0$, 则 $\ddot{F} < 0$.

由上所述我们得到结论: $R < R_c$ 时单畴态的自由能处于极小值; $R > R_c$ 时单畴态的自由能不是极小值.

至于 $R = R_c < \infty$ 时, 采用类似于我们对 $H = H_n$ (H_n 为形核场) 点的饱和态的稳定性的分析方法^[5], 不难证明: 若 $\ddot{S}_0 > 0 (< 0)$, 则单畴态的自由能处于 (不处于) 极小值.

3. 分歧解在 R_c 近旁的稳定性及与单畴态的自由能之比较

完全类似于反磁化形核的情形^[5], 我们有结论: $\ddot{S}_0 > 0$ 时, 分歧解的自由能处于极小值, 且低于单畴态的自由能; $\ddot{S}_0 < 0$ 时, 分歧解的自由能不处于极小值, 且大于单畴态的自由能.

五、初始成畴行为

由第三、四节的结果, 知在对称情况下初始成畴行为具有如下特点: 当旋径 R 从充分小的值开始增大时, 若 $2k_1 - n_z \geq 0$, 则磁化态一直保持为单畴态. 若 $-n_T < 2k_1 - n_z < 0$, 在 R 达到有限的临界尺寸 R_c 以前保持为单畴态. 当 R 继续增大到经过 R_c 时, 如果 $\ddot{S}_0 < 0$, 则磁化态在 $R = R_c$ 处不连续地跃变为非均匀态; 如果 $\ddot{S}_0 > 0$, 则在 $R = R_c$ 近旁随着 R 的继续增加, 磁化态沿涡旋模式分歧解 (28) 式连续地偏离单畴态.

据此可以得到连续和不连续转变的充要条件

$$\begin{aligned}\bar{S}_0 > 0 &\Leftrightarrow \text{初始成畴是连续的;} \\ \bar{S}_0 < 0 &\Leftrightarrow \text{初始成畴是不连续的.}\end{aligned}\quad (49)$$

当 $\bar{S}_0$ 难以精确计算时,有充分条件

$$\begin{aligned}\bar{S}_1 > 0 &\Rightarrow \text{初始成畴是连续的;} \\ \bar{S}_2 < 0 &\Rightarrow \text{初始成畴是不连续的.}\end{aligned}\quad (50)$$

由(36)和(40)式以及上述判据,知无穷长圆柱状铁磁体的初始成畴是连续的;立方各向异性的球状铁磁体当 $1.35M_s^2 < K_1 < 2.09M_s^2$ 时,初始成畴是不连续的.

下面讨论两个具体的初始成畴例子.

1) 铁磁粒子的自由长大,如析出型硬磁合金中铁磁相由非磁性基体内的析出,或微粉磁体所用铁磁微粒的外延生长.随着粒子尺寸的增加,将发生如前面描述的由单畴粒子到非单畴粒子的转变.

2) 如果所考察的状态囿于铁磁体在 z 轴方向被饱和磁化后的剩磁状态,则随着铁磁体尺寸的增大,这种状态也将以前面描述的初始成畴特点而变化.下面可以证明,对于这种情形,按本文的分析方法与按反磁化形核的分析方法^[5],所得到的结论是协调的:

反磁化形核的分界尺寸 $R_0 = \kappa_1/\sqrt{n_T}$,由(12)和(28)式知

$$R_0 < R_c. \quad (51)$$

当 $R \leq R_0$ 时,形核场 $H_n = -(2k_1 + n_T - n_z)$; 当 $R_0 \leq R$ 时, $H_n = -[2k_1 + \kappa_1^2/R^2 - n_z]$. 总之,若 $R < R_c$, 则 $H_n < 0$. 因此剩磁状态是饱和磁化状态即单畴态 $u = k$. 若 $R > R_c$, 则 $H_n > 0$, 故当外磁场从 ∞ 降至 H_n 时,磁化态便开始从饱和态转变为非均匀态,因而剩磁状态必非均匀的.

六、关于单畴临界尺寸

把在第一节中所提及的严格单畴临界尺寸记为 R_{c0} ,则显然有

$$R_c \leq R_{c0} \leq R_a, \quad (52)$$

即 R_c 和 R_a 分别构成 R_{c0} 的一对上下限. 当 k_1 甚小时,这一对上下限十分接近,从而是对 R_{c0} 的相当精确的估计. 特别当 $n_z - n_T < 2k_1 < 0$ (此时 D 必为长椭球,包括无穷长圆柱)时,有

$$R_{c0} = R_c = R_a = \kappa_1/\sqrt{n_z - 2k_1}; \quad (53)$$

而且对无穷长圆柱当 $k_1 \geq 0$ 时,也有

$$R_{c0} = R_c = R_a = \infty. \quad (54)$$

虽然 $2k_1 - n_z \rightarrow 0^{(-)}$ 时 $R_c \rightarrow \infty$, 且 $2k_1 - n_z \geq 0$ 时 $R_c = \infty$, 但通过比较单畴态与某些特别设计的非均匀态的自由能(类似于 Kittel^[1] 和 Brown^[2]) 易证,除无穷长圆柱而外,总有 $R_{c0} < \infty$. 在这种情况下,以 R_c 作为 R_{c0} 的上限便很不精确.

七、几点注记

1. 倘若条件(12)式不被满足,或者铁磁体是具有立方磁各向异性的扁椭球,则在充分

小的 R 值下自由能最低的状态(单畴态)虽然仍是均匀态,但不再是或不仅是 $\mathbf{u} = \pm \mathbf{k}$. 从新的单畴态出发的初始成畴问题,原则上也可按本文的方法来进行研究,不过在数学上要复杂得多.

2. 如果我们不要求在充分小的 R 值下单畴态对应于自由能的最小值,而只要求它对应于自由能的极小值,则在比第二节中条件 1)–4) 更弱的假设下仍 可把 $\mathbf{u} = \mathbf{k}$ 取作参考解(单畴态). 特别是磁各向异性还可以包括六方型;对 $g(\mathbf{u})$ 不必做任何近似(但实际上只须展开到 α, β, γ 的四次方);无论对哪种磁各向异性类型, D 都可以是任何旋转椭球(包括无穷长圆柱和球作为特例);而且可以考虑外磁场的影响 ($H \neq 0$). 在这些较弱的条件下,也可以完全按照本文的方法来讨论初始成畴问题,其结果已在文献[12]中摘要报道. 特别是有

$$R_c = \begin{cases} \infty & H + 2k_1 - n_z \geq 0, \\ \kappa_1 / \sqrt{n_z - 2k_1 - H} & -n_T < H + 2k_1 - n_z < 0. \end{cases} \quad (55)$$

当 $H = 0$ 时,它与本文的结果相同. 表 3 中对 Ni 的 R_c 的计算便是在这种意义下进行的.

参 考 文 献

[1] 关于单畴(粒子)问题的研究历史,可参看:

R. M. Bozorth, *Ferromagnetism*, D. Van Nostrand Inc., New York, (1951), 828

C. B. Вонсовский, 现代磁学(中译本), 科学出版社, 199–205 (1960);

C. Kittel, *Solid State Phys.*, **3**(1956), 437; E. Kondorsky (E. И. Кондорский), *IEEE Trans. Mag.*, **15**(1979), 1029.

[2] W. F. Brown, Jr., *Ann. New York Acad. Sci.*, **147**(1969), 461; *J. Appl. Phys.*, **30**(1968), pt. 2, 993.

[3] E. H. Frei, S. Shtrikman & D. Treves, *Phys. Rev.*, **106**(1957), 446.

[4] E. P. Wohlfarth, In *Magnetism*, Vol. 3 (G. T. Rado & H. Suhl eds.), Acad. Press. New York, (1963), 351.

[5] 蒲富恪、李伯斌,中国科学, (1981), 第 12 期;中国科学 (A 辑), (1982) 第一期,将发表.

[6] M. S. Berger, *Nonlinearity and Functional Analysis*, Acad. Press, New York, (1977). Chap. 4.

[7] M. Millman, In *Bifurcation Theory and Nonlinear Eigenvalue Problems* (J. B. Keller & B. Antman eds.), Benjamin Inc., New York, (1969), 411–434.

[8] W. F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, Intersci. Pub., New York, (1963).

[9] W. F. Brown, Jr., *Magnetostatic Principles in Ferromagnetism*, North-Holland Pub., Amsterdam (1962), Chap. 3.

[10] W. Miller, Jr., *Symmetry and Separation of Variables*, Addison-Wesley Pub., London, (1977), Chap. 3.

[11] R. S. Tebble & D. J. Craik, 磁性材料(中译本), 科学出版社, 55; 22 页(1979).

[12] 蒲富恪、李伯斌, 科学通报, **26**(1980), 825.

BIFURCATION SOLUTIONS OF BROWN'S EQUATION AND PROBLEM OF FORMATION OF INCIPIENT MAGNETIC DOMAIN

LI BO-ZANG PU FU-CHO

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

The problem of formation of incipient magnetic domain in the scheme of Brown's equation is one of the typical problems of bifurcation. A scale transformation is introduced, so that the size of a ferromagnetic body appears explicitly as a parameter in the expressions of free energy and Brown's equation. We generalize the perturbation method in bifurcation theory to study the initial bifurcation of Brown's equation. After an analysis of the stability of single-domain state and bifurcation solutions, we arrived at the conclusion that the critical size of incipient domain formation equals to the smallest positive bifurcation point of size parameter and the process of incipient domain formation takes place either continuously following the bifurcation solutions starting from this bifurcation point or discontinuously with a jump at this point. The criteria for discriminating the continuity and discontinuity of such a transition were given. In addition, we also obtained the lower and upper limits of the precise critical size of single-domain, and also its exact value in particular cases.

非线性电子磁漂移波

章 扬 忠

(中国西南物理研究所)

1981年4月24日收到

提 要

本文采用重整化方法处理了无剪切磁场漂移近似下的非线性电子磁漂移波,并分析了它与托卡马克电子反常输运之间的关系。所得到的扩散系数 $D_{\perp} \sim (\omega_{pe} T_e / c B_0 L_n k_{\perp}^2)$ 与现有托卡马克实验结果大致符合。

一、引 言

托卡马克上所出现的电子反常热传导是长期以来未予解决的一个难题^[1]。这个问题对于未来堆条件下托卡马克的重要意义是众所周知的^[2]。通常认为,电子反常热传导是由等离子体的集体相互作用所引起。作为一种简单的考虑,人们起先集中了较大的力量来研究静电波,特别是托卡马克中的静电漂移不稳定性所导致的电子反常热传导问题^[3]。但是自1978年以来,由于认识到剪切磁场对静电漂移波的稳定作用之后^[4],发现仅在某些特殊情况下才能使这种漂移波得到激发^[5]。因而人们又开始寻找有可能导致电子反常热传导的新的不稳定机制。Rosenbluth曾建议采用随机磁场模型来处理这个问题^[6]。不过该模型中所采用的空间随机性磁场究竟是怎样产生的在当时还不很清楚。最近Drake等人建议^[7-9],漂移撕裂模可以导致随机磁场;因而有可能作为导致电子反常热传导的一种机制。他们同时指出,这种模式是在平板位形下导致低频微观不稳定性的为数不多的模式之一^[8]。但是撕裂模的激发仅对剪切磁场才存在;它的色散关系应由剪切效应产生的边界层内外区解的匹配关系决定,这相当于边界层的整体性处理方式。然而对同样的方程也存在定域性色散关系;所对应的波激发并不一定要求存在剪切磁场。本文把这种波称为电子磁漂移波。

电子磁漂移波与托卡马克上所出现的电子反常热传导之间的关系可以通过以下的物理讨论来理解。最简单的方式即是采用随机行走模型。设涨落电场为 $\tilde{E}$, 那末在恒定磁场 B_0 中粒子的电漂移速度为 $v_D = (c\tilde{E}_{\perp}/B_0)$ 。粒子在涨落场中的随机行走频率 $\nu_s = (\delta t)^{-1}$, 对应的行走步长则为 $\delta r \sim (c\tilde{E}_{\perp}/B_0\nu_s) = (c\tilde{E}_{\perp}/B_0)\delta t$ 。随机行走导致粒子扩散系数 $D_{\perp} \sim (\delta r)^2/(\delta t) \sim (c\tilde{E}_{\perp}/B_0)^2\delta t$ 。可以设想粒子受到波峰的一次推动即相当于一次行走,这时 δt 即为一个粒子漂移一个波长所需的时间,即 $\delta t \sim (B_0/k_{\perp}\tilde{E}_{\perp}c)$, 代入后即得到

$$D_{\perp} \sim (c\tilde{E}_{\perp}/B_0k_{\perp}). \quad (1.1)$$

如果把(1.1)式直接应用于静电漂移波的情况立即可以看出,它对于电子和离子给出同样的效应. 为说明电子的扩散系数特别大是很难用 $\tilde{E}_\perp$ 为静电场来解释的. 但如果把 $\tilde{E}_\perp$ 理解为由带电粒子在涨落磁场中所感受到的洛伦兹电场,即 $\tilde{E}_\perp \rightarrow (\tilde{B}v/c)$, 那末立即可以看出,由于电子和离子的热运动速度不同而导致电子和离子的湍性扩散系数有数量级上的差别. 这时由(1.1)式得到带电粒子在涨落磁场中的扩散系数为

$$D_\perp \sim (\tilde{B}/B_0)(v/k_\perp). \quad (1.2)$$

对托卡马克上的典型数据来说, $T_e \sim 1\text{keV}$, $k_\perp \sim (1-10)\text{cm}^{-1}$, $(\tilde{B}/B_0) \sim 10^{-4}-10^{-5}$, 所得到的 $D_\perp \sim 10^4\text{cm}^2/\text{s}$; 它与实验上所观察到的数量级相符合. 而 $T_i \leq T_e$ 导致离子的湍性扩散系数比电子的小五十倍左右. 如果离子的湍性扩散系数不超过它的新经典输运系数或和其同数量级,那末反常电子热传导就可以得到解释. 这个简单的物理模型向我们启示了在研究电子反常热传导时将只寻求离子运动和静电波的效应为不重要时的解.

另一方面,按照 $D_\perp$ 的数量级,对应的湍性碰撞频率 $\Gamma_k \sim k_\perp^2 D_\perp$ 将大约在 10^4-10^6 Hz 之间的范围. 而一般现有托卡马克上的电子-离子的两体碰撞频率 $\nu_{ei} \sim 10^5\text{Hz}$. 这个情况之所以重要是因为按照漂移撕裂模的概念^[7],即便是处于无碰撞区和半碰撞区之间的电子,由于湍性碰撞的出现,其物理图象也要受到重要的修正. 为处理方便起见,本文仅考虑 $\Gamma_k > \nu_{ei}$ 的情况,并把两体碰撞效应略去. 由于有这样高的湍性碰撞频率,在对电子漂移波做非线性处理时必须考虑重整化效应. 这是本文与文献[8]中所做非线性处理的主要不同之处.

二、非线性漂移动力方程

由于电磁漂移波的频率 $\omega \sim \omega^*$ 远小于电子的迴旋频率,它的波长远大于电子的拉摩半径,故而漂移动力方程是一个很好的近似. 为了说明漂移动力方程的物理意义,这里先给出启发式的推导,然后再用 $(1/B_0)$ 展开方法做严格处理.

在漂移近似下,由刘维定理出发,电子导向中心在恒定磁场 B_0 中所满足的 Bragov 方程在 $(1/B_0)$ 近似下可写为

$$\{\partial_t + v \cdot (\nabla + q\tilde{E}\partial_\epsilon) + p\partial_\epsilon\}f = 0, \quad (2.1)$$

其中 $\partial_t \equiv \partial/\partial t$, $\partial_\epsilon \equiv \partial/\partial \epsilon$, $\epsilon \equiv (mv^2/2)$,

$$v = v_\parallel + v_D. \quad (2.2)$$

这里 v_D 是导向中心的漂移速度, $v_\parallel = v_\parallel b_0$, $b_0 \equiv B_0/|B_0|$. $v \cdot q\tilde{E}$ 代表运动粒子在涨落电场中所做的功. 而 p 则代表非电场性质的功. 由于漂移近似下磁矩守恒,故和 $\partial_{\mu_0} \equiv \partial/\partial \mu_0$ 有关的项不出现.

在恒定磁场中导向中心在 $(1/B_0)$ 近似下的漂移速度由以下诸项组成: 非均匀磁场中的曲率漂移和梯度漂移,扰动电场的电漂移. 应当注意,在出现扰动磁场的情况下,除了实验室坐标系中的电场之外,还有粒子沿磁力线运动时在涨落磁场中所感受到的洛伦兹电场. 因此有

$$v_D = (1/mQ_0)b_0 \times [\mu_0 \nabla B_0 + mv_\parallel^2 b_0 \cdot \nabla b_0 - q\tilde{E} - (q/c)(v_\parallel \times \tilde{B})]. \quad (2.3)$$

涨落磁场的存在使得磁矩在磁场的非均匀方向上受到一个力。这个力所做的功就是 p 的来源。对于磁矩系统来说, 如果磁矩是由于外场 $\mathbf{B}$ 磁化而形成的 (当 $\mathbf{B}$ 撤除时 μ 消失), 则对应的自由能为 $dF = -\boldsymbol{\mu} \cdot d\mathbf{B}$ 。由于等离子体的逆磁性质, $\boldsymbol{\mu} = -\mu \mathbf{b}_0$ 。故而功为: $p = dF/dt = \mu \mathbf{b}_0 \cdot (d\mathbf{B}/dt) = \mu \mathbf{b}_0 \cdot \dot{\mathbf{B}}$ 。在 $(1/B_0)$ 近似下, $\mu = (mv_{\perp}^2/2B) \sim (mv_{\perp}^2/2B_0) \equiv \mu_0$, 故有

$$p = \mu_0(\dot{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{b}_0). \quad (2.4)$$

因此(2.1)–(2.4)式即为 $(1/B_0)$ 近似下的漂移动力方程。

下面给出用 $(1/B_0)$ 展开方法求漂移动力方程的主要步骤。单粒子的 Bragov 方程为

$$\{\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla + (q/m)\tilde{\mathbf{E}} \cdot \boldsymbol{\partial} + (q/mc)(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\partial} + (q/mc)(\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0) \cdot \boldsymbol{\partial}\} f = 0. \quad (2.5)$$

这时采用 $(\epsilon, \mu_0, \phi, \sigma)$ 坐标系, 按 $(1/B_0)$ 展开并对 ϕ 求平均。速度空间中的坐标关系如图 1 所示。按坐标变换容易证明:

$$(q/m)\tilde{\mathbf{E}} \cdot \boldsymbol{\partial} = q(\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{E}})\partial_{\epsilon} + (q/B_0)(\mathbf{v}_{\perp} \cdot \tilde{\mathbf{E}})\partial_{\mu_0} + (q/mv_{\perp})\tilde{\mathbf{E}} \cdot (\cos \phi \boldsymbol{\tau}_0 + \sin \phi \mathbf{n}_0)\partial_{\phi}, \quad (2.6)$$

$$(q/mc)(\mathbf{v} \times \tilde{\mathbf{B}}) \cdot \boldsymbol{\partial} = (q/mc)\tilde{\mathbf{B}} \cdot \{ (mv_{\parallel}v_{\perp}/B_0)(\sin \phi \mathbf{n}_0 - \cos \phi \boldsymbol{\tau}_0)\partial_{\mu_0} + [(\mathbf{v}_{\parallel}/v_{\perp})(\cos \phi \mathbf{n}_0 + \sin \phi \boldsymbol{\tau}_0) - \mathbf{b}_0]\partial_{\phi} \}, \quad (2.7)$$

$$(q/mc)(\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0) \cdot \boldsymbol{\partial} = -\Omega_0 \partial_{\phi}. \quad (2.8)$$

这里 $\Omega_0 \equiv (qB_0/mc)$ 为带电粒子在磁场 B_0 中的拉摩频率。

由于 μ_0 和 ϕ 通过 B_0 和 $\boldsymbol{\tau}_0, \mathbf{n}_0$ 而与空间有关, 则

$$\nabla = \nabla' + (\nabla \mu_0)\partial_{\mu_0} + (\nabla \phi)\partial_{\phi}, \quad (2.9)$$

其中 $\nabla' \equiv (\partial/\partial \mathbf{r})_{\mu_0, \phi}$ 。容易证明:

$$\nabla \mu_0 = (-1/B_0)\{mv_{\parallel}v_{\perp}(\cos \phi \mathbf{n}_0 + \sin \phi \boldsymbol{\tau}_0) \cdot \nabla \mathbf{b}_0 + \mu_0 \nabla B_0\}, \quad (2.10)$$

$$\nabla \phi = \mathbf{n}_0 \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_0 + (v_{\parallel}/v_{\perp})(\cos \phi \mathbf{b}_0 \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_0 - \sin \phi \mathbf{b}_0 \cdot \nabla \mathbf{n}_0). \quad (2.11)$$

采用 $(1/B_0)$ 近似后, (2.5) 式中左方的前四项作为 $(1/\Omega_0)$ 的一级量, 再使 $f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots$ 作为 $(1/\Omega_0)$ 的零级量, 一级量 $\dots$ 后, 得到方程链为

$$\Omega_0 \partial_{\phi} f^{(0)} = 0, \quad (2.12)$$

$$\{\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla + (q/m)(\tilde{\mathbf{E}} \cdot \boldsymbol{\partial}) + (q/mc)(\mathbf{v} \times \tilde{\mathbf{B}}) \cdot \boldsymbol{\partial}\} f^{(n)} = \Omega_0 \partial_{\phi} f^{(n+1)}, \quad (2.13)$$

($n = 0, 1, 2, \dots$)。取(2.13)式中 $n = 0$, 并对 ϕ 取平均, 即

$$\langle f \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi f, \quad (2.14)$$

则得到

$$(\partial_t + v_{\parallel} \nabla' + qv_{\parallel} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel} \partial_{\epsilon}) f^{(0)} = 0. \quad (2.15)$$

该式说明 $f^{(0)}$ 与 μ_0 无关。把 $n = 0$ 的(2.13)式对 ϕ 做不定积分得到

$$f^{(1)} = \Omega_0^{-1} v_{\perp} (\sin \phi \mathbf{n}_0 - \cos \phi \boldsymbol{\tau}_0) \cdot (\nabla' + q \tilde{\mathbf{E}} \partial_{\epsilon}) f^{(0)} + C. \quad (2.16)$$

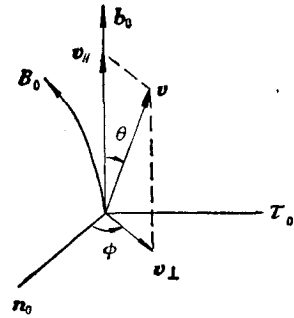


图 1

这里 C 是积分常数. 令

$$f^{(1)} = \langle f^{(1)} \rangle + \tilde{f}^{(1)}, \quad (2.17)$$

并把它代入(2.13)式中 $n = 1$ 的方程, 并对 ϕ 平均后即得到 $\langle f^{(1)} \rangle$ 所满足的方程为

$$(\partial_t + v_{\parallel} \nabla_{\parallel} + q v_{\parallel} \tilde{E}_{\parallel} \partial_{\epsilon}) \langle f^{(1)} \rangle + \langle \{ \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla + (q/m)(\tilde{\mathbf{E}} \cdot \boldsymbol{\theta}) + (q/mc)(\mathbf{v} \times \tilde{\mathbf{B}}) \cdot \boldsymbol{\theta} \} \tilde{f}^{(1)} \rangle = 0. \quad (2.18)$$

经过并不太难的代数运算后即得到

$$(\partial_t + v_{\parallel} \nabla_{\parallel} + q v_{\parallel} \tilde{E}_{\parallel} \partial_{\epsilon}) \langle f^{(1)} \rangle + (\mathbf{v}_D + \mathbf{v}_{D\parallel}) \cdot (\nabla' + q \tilde{\mathbf{E}} \partial_{\epsilon}) f^{(0)} + \mu_0 (\tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{b}_0) \partial_{\epsilon} f^{(0)} = 0, \quad (2.19)$$

其中 $\mathbf{v}_D$ 即为(2.3)式所示, 而

$$\mathbf{v}_{D\parallel} = (\mu_0 c / q) \mathbf{b}_0 \cdot (\nabla \times \mathbf{b}_0) \mathbf{b}_0. \quad (2.20)$$

它是由 B_0 的剪切效应引起的平行漂移速度.

在一级近似内, 利用(2.15)式及 $\langle f \rangle = \langle f^{(0)} \rangle + \langle f^{(1)} \rangle$ 后即得到(2.1)–(2.4)式, 只不过其中的 $\mathbf{v}_D$ 应变为 $\mathbf{v}_D \rightarrow \mathbf{v}_D + \mathbf{v}_{D\parallel}$.

本节中的符号 ϕ , $\langle \cdots \rangle$ 及 $\sim$ 所代表的意义仅在本节之内有效.

三、线性电子磁漂移波

为今后讨论方便起见, 这里给出有剪切平板模型中准稳电磁场的电子漂移动力方程. 平板模型的位形为

$$\mathbf{B}_0 = B_0 [\mathbf{z}_0 + (x/L_s) \mathbf{y}_0]. \quad (3.1)$$

在 (x/L_s) 的一级近似下, $\mathbf{b}_0 \sim \mathbf{z}_0 + (x/L_s) \mathbf{y}_0$. 这时曲率漂移和梯度漂移在同级近似下也为零而剪切效应导致的平行漂移速度 $v_{D\parallel} \sim (\mu_0 c / q L_s) \sim (\rho / L_s) v_{\perp}$. 它在本文考虑的情况下远小于粒子的自由速度, 故将其略去. 为以下分析方便起见将采用势的描述:

$$\tilde{\mathbf{E}} = -\nabla \phi - (\dot{\tilde{\mathbf{A}}} / c), \quad \tilde{\mathbf{B}} = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}.$$

这里 ϕ 代表静电势, $\sim$ 代表涨落量.

按照引言所述的观点, 仅寻求静电势和离子运动为不重要的解. 这时扰动电流仅由电子所贡献. 电子电流由平行运动电流和横向漂移电流组成: 感生电场形成的横向漂移电流可表为 $e v_p (\tilde{B} / B_0)$, 这里 v_p 是波的相速, 而洛伦兹电场形成的横向漂移电流可表示为 $e v_e (\tilde{B} / B_0)$, 这里 v_e 代表电子的热速度. 对低 β 等离子体来说, $(\tilde{B} / B_0)$ 是一个很小的量. 因此 $\tilde{j}_{e\parallel} \gg \tilde{j}_{e\perp}$. 取库仑规范 $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{A}} = 0$ 后, 由准稳电磁场的安培定律可知 $\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{A}_{\parallel} \mathbf{b}_0$. 这里立刻看出, 感生电场 $\tilde{\mathbf{E}} \sim -(\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\parallel} / c) \mathbf{b}_0$ 和 $\mathbf{b}_0$ 平行, 它将不引起漂移, 即

$$\mathbf{v}_D \rightarrow (v_{\parallel} / B_0) (\nabla \tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{b}_0). \quad (3.2)$$

也就是说, 在略去静电势后, 漂移运动仅由洛伦兹电场所引起, 它和感生电场垂直, 因而也不做功. 这时 $\tilde{\mathbf{B}} \sim \nabla \tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{b}_0$. 磁矩在涨落场中不做功. 即 $\tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{b}_0 = 0$. 因此平板模型中电子磁漂移波的基本方程为

$$\{ \partial_t + v_{\parallel} \nabla_{\parallel} + (v_{\parallel} / B_0) (\nabla \tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{b}_0) \cdot \nabla + (e / mc) \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\parallel} \partial_{\parallel} \} f = 0. \quad (3.3)$$

$$\nabla^2 \tilde{A}_{\parallel} = \frac{4\pi e}{c} \int d v_{\parallel} v_{\parallel} \tilde{f}. \quad (3.4)$$

在均匀磁场的情况可以取平衡分布函数 f_0 为

$$f_0 = \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} n \exp\left(-\frac{mv_{\parallel}^2}{2T}\right). \quad (3.5)$$

它满足条件 $(\partial_t + v_{\parallel}\nabla_{\parallel})f_0 = 0$. 这时 $\mathbf{b}_0 \rightarrow \mathbf{z}_0$, 于是(3.3)式变为

$$\begin{aligned} & \{\partial_t + v_{\parallel}\nabla_{\parallel} + (v_{\parallel}/B_0)(\nabla\tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{z}_0) \cdot \nabla + (e/mc)\tilde{A}_{\parallel}\partial_{\parallel}\}f_0 \\ & = -(v_{\parallel}/B_0)(\nabla\tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{z}_0) \cdot \nabla f_0 - (e/mc)\tilde{A}_{\parallel}\partial_{\parallel}f_0. \end{aligned} \quad (3.6)$$

注意到对均匀磁场 $\nabla\tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{z}_0 = \tilde{\mathbf{B}}$, 因此漂移项即相当于粒子沿扰动磁场 $\tilde{\mathbf{B}}$ 的运动. 本文以下的处理中仅考虑密度(在 x 方向的梯度所引起的)漂移, 即 $\nabla f_0 = -(\mathbf{x}_0/L_n)f_0$. 于是(3.6)式的线性化方程和(3.4)式给出了定域色散关系为

$$e_k = 1 + \frac{4\pi e^2}{T c^2 k^2} (\omega - \omega_n^*) \int_c dv_{\parallel} v_{\parallel}^2 f_0 (\omega - k_{\parallel} v_{\parallel})^{-1} = 0, \quad (3.7)$$

式中 $\omega_n^* \equiv (T c k_{\parallel} / e B_0 L_n)$ 即为电子的逆磁频率. (3.7)式中的积分路径 c 应按推迟解的始值条件选择, 于是按标准的处理方法可由(3.7)式得到线性色散关系和增长率.

对电子的运动, (3.7)式中的主值积分应取低相速近似. 这时得到

$$\omega_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \{\omega_n^* \pm \sqrt{\omega_n^{*2} + \Omega^2}\}, \quad (3.8)$$

式中 $\Omega \equiv (\sqrt{2} v_e c |\mathbf{k}| k_{\parallel} / \omega_{pe})$, ω_{pe} 为电子等离子体频率. 对应的线性增长率为

$$\gamma_{\pm}(\mathbf{k}) = -\frac{\sqrt{\pi} \Omega^2}{8 k_{\parallel} v_e} \left(1 \pm \frac{\omega_n^*}{\sqrt{\omega_n^{*2} + \Omega^2}}\right). \quad (3.9)$$

这时可以看出, 对于(3.8)式给出的两个分支, 仅当 $k_{\parallel} < 0$ 时才是不稳定的; 对于正频波分支, 不稳定的波相速和磁场反平行, 而对于负频波分支, 不稳定波相速和磁场平行.

$k_{\parallel}$ 的存在对于波的激发是必要的. 如果在(3.7)式中取 $k_{\parallel} = 0$, 则得到的是临界稳定模式:

$$\omega_0 = \omega_n^* \left(1 + \frac{c^2 k^2}{\omega_{pe}^2}\right)^{-1}. \quad (3.10)$$

这在物理上是显然的, 因为对于电子磁漂移波来说, 波的激发机制仅由波-粒子共振效应产生, 如果 $k_{\parallel} = 0$, 那末这种共振机制消失, 波不能激发或阻尼.

四、相干重整化与非线性色散关系

正如引言中所指出的那样, 对于高湍性碰撞频率的情况, 在研究非线性电子磁漂移波时需要采用重整化处理方式. 在文献[10]中曾建议了一种完全重整化理论——相干重整化. 这个理论的主要特点在于: (1)它给出了在微扰论上自洽的, 彻底的重整化程序. 该理论已被证明是完全可重整化的. (2)把扰动分布函数分解为相干部份和绝对非相干部份; 前者决定了非线性媒质的性质给出色散关系, 而后者决定了非线性源而将给出湍流谱和能量饱和机制. (3)它保证了漂移波在横向漂移电流无功时的能量守恒^[11].

对于电子磁漂移波来说, 由于它的基本方程(3.3)和(3.4)式在形式上与漂移近似下的

Власов-Poisson 方程十分类似,因此可以直接把静电波的相干重整化理论推广到电子磁漂移波。在傅里叶变换之后,扰动分布函数写为

$$f_k = G_k \hat{L}_0(k) f_0 A_k + \sum_{k_1} G_k \hat{L}(k, k_1) A_{k_1} f_{k-k_1} + i G_k \Gamma_k f_k, \quad (4.1)$$

式中

$$G_k \equiv (\omega - k_{\parallel} v_{\parallel} + i \Gamma_k)^{-1}, \quad (4.2)$$

$$\hat{L}_0(k) \equiv (e/Tc)(\omega - \omega^*) v_{\parallel}, \quad (4.3)$$

$$\hat{L}(k, k_1) \equiv -(e\omega_1/mc) \partial_{\parallel} - i(\mathbf{k} \times \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{z}_0(v_{\parallel}/B_0). \quad (4.4)$$

在以上的处理中利用了时空均匀性。为简单起见,我们自此之后略去傅里叶表示中扰动量的波纹记号 $\sim$ 和 A 的平行记号 $\parallel$ 。今后波纹记号 $\sim$ 仅代表绝对非相干分布函数。把文献[10]中的 ϕ_k 理解为 A_k 来表示波纹线,把波-粒子相互作用顶点,取为(4.4)式,把静态激发顶点 $\bullet$ 取为(4.3)式,则(4.1)式的重整化迭代程序将和文献[10]完全相同,由于图形的结构相同,可重整化性的证明以及对应物理量的图形表示也完全相同。按照文献[10]的记法,

$$f_k = f_k^{(c)} + \tilde{f}_k. \quad (4.5)$$

这里 $f_k^{(c)}$ 代表扰动分布函数的相干部份。可记为 $f_k^{(c)} = \mathcal{A}_k A_k$, 而 $\tilde{f}_k$ 则代表扰动分布函数的绝对非相干部份。把(4.5)式代入安培定律,并把相干部份取为媒质效应后得到重整化导电率

$$\sigma_k = -\frac{ice}{\omega} \int dv_{\parallel} v_{\parallel} \mathcal{A}_k. \quad (4.6)$$

对应的非线性色散关系为

$$1 + \frac{4\pi e}{c k^2} \int dv_{\parallel} v_{\parallel} \mathcal{A}_k = 0. \quad (4.7)$$

$\mathcal{A}_k$ 可用图形表示为

$$\mathcal{A}_k = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \dots \quad (4.8)$$

而相干重整化给出的湍性碰撞频率为

$$-i\Gamma_k = \text{[Diagram 3]} + \dots \quad (4.9)$$

下面讨论非线性色散关系的求解。为此仅考虑 $\mathcal{A}_k$ 的最低级近似。这时在(4.7)式对 $v_{\parallel}$ 的积分中把 (ω/Γ_k) 取到一级近似而把 $(k_{\parallel} v_{\parallel}/\Gamma_k)$ 取到二级近似。在饱和情况下 ω 仅有实部,于是解出饱和时的色散关系为

$$\omega = \frac{1}{2} \left\{ \omega_n^* \pm \sqrt{\omega_n^* - \frac{4c^2 k^2 \Gamma_k^2}{\omega_{pe}^2}} \right\} \quad (4.10)$$

及

$$(k_{\parallel} v_e / \Gamma_k)^2 = \frac{2}{3}. \quad (4.11)$$

(4.10) 式决定了湍性碰撞频率的上界为

$$\Gamma_k \leq \frac{\omega_{pe} \omega_n^*}{2c k_{\perp}}. \quad (4.12)$$

而(4.11)式给出了 Γ_k 和 $k_{\parallel}$ 之间的关系, 这相当于谱所满足的条件. 正如下面将要证明的 $\Gamma_k \sim k_{\perp}^2 D_{\perp}$ (见(5.2)式), 则(4.11)和(4.12)式决定了 $k_{\parallel}$ 的条件和横向扩散系数. 这时

$$D_{\perp} \sim \frac{\omega_{pe} T_e}{e B_0 L_n k_{\perp}^2}. \quad (4.13)$$

按托卡马克上的典型数据: $B_0 \sim 10^5 \text{Gs}$, $T_e \sim 1 \text{keV}$, $k_{\perp} \sim 10 \text{cm}^{-1}$, $L_n > 10 \text{cm}$, $n \sim 10^{14} \text{cm}^{-3}$ 估计出 $D_{\perp} \sim 10^4 \text{cm}^2/\text{s}$, 和实验给出的量级相符合. 这些数据同时预言了 $k_{\parallel} \sim 10^{-3} \text{cm}^{-1}$, 它和下一节的讨论所给的关系在数量上是相容的.

五、 Γ_k 的 Марков 近似

除了上面给出的微扰论处理方法外, 还可以利用统计模型来得到某些有用的结论. 这方面的讨论和 Dupree 讨论静电漂移波的情况类似^[12]. 在文献 [13] 中曾给出了 Gauss 过程中单粒子传播函数所满足的方程, 它在横向 Марков 近似下可写为

$$(\partial_t + v_{\parallel} \nabla_{\parallel} - \nabla_{\perp}^2 D_{\perp}^{\mu\nu} \nabla_{\perp}^2) G = 0. \quad (5.1)$$

对应的傅里叶表示为

$$G_k = (\omega - k_{\parallel} v_{\parallel} + i k_{\perp}^2 D_{\perp}^{\mu\nu} k_{\perp}^2)^{-1}. \quad (5.2)$$

由此可知, 由横向漂移运动所决定的湍性碰撞频率为 $\Gamma_k = k_{\perp}^2 D_{\perp}^{\mu\nu} k_{\perp}^2$. 在二维各向同性近似下即有 $\Gamma_k \sim k_{\perp}^2 D$. 在(5.1)式中的 $D_{\perp}^{\mu\nu}$ 定义为^[13]

$$D_{\perp}^{\mu\nu} = \tau^{\mu\nu\rho\sigma} \left(\frac{c}{B_0} \right)^2 \int_0^{\infty} d\tau \langle E^{\rho}(\mathbf{r}, t) E^{\sigma}(\mathbf{r}(t-\tau), t-\tau) \rangle. \quad (5.3)$$

张量 $\tau^{\mu\nu\rho\sigma}$ 的非零部份仅为 $\tau^{1122} = \tau^{2211} = 1$, $\tau^{1221} = \tau^{2112} = -1$. 其中 $\mathbf{r}(t-\tau)$ 代表粒子在湍性场中的真实轨道, $\mathbf{E}$ 代表形成电漂移运动的等效电场, 对电子磁漂移波来说, 它即是洛伦兹电场 $\mathbf{E} = (v_{\parallel}/c)(\nabla \tilde{A}_{\parallel} \times \mathbf{b}_0)$, $\langle \cdots \rangle$ 代表系综平均. 利用傅里叶变换后,

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} d\tau \langle E^{\rho}(\mathbf{r}, t) E^{\sigma}(\mathbf{r}(t-\tau), t-\tau) \rangle \\ &= (v_{\parallel}/c)^2 \int_0^{\infty} d\tau \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 (i\mathbf{k}_1 \times \mathbf{z}_0)^{\rho} (i\mathbf{k}_2 \times \mathbf{z}_0)^{\sigma} \\ & \times \exp[-i\omega t_1 + i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - i\omega_2(t-\tau)] \cdot \langle A_{k_1} A_{k_2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.4)$$

为计算 $\langle \cdots \rangle$, 可利用 Новиков 公式^[14], 得到

$$\begin{aligned} \langle A_{k_1} A_{k_2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \rangle &= \int d\mathbf{k} \langle A_{k_1} A_k \rangle \left\langle \frac{\delta}{\delta A_k} A_{k_2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \right\rangle \\ &= \langle A_{k_1} A_{k_2} \rangle \langle e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \rangle \end{aligned}$$

$$+ \int dk \langle A_{k_1} A_k \rangle \left\langle A_{k_2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} i\mathbf{k}_2 \cdot \frac{\delta}{\delta A_k} \mathbf{r}(t-\tau) \right\rangle. \quad (5.5)$$

(5.5)式中右方第二项将属于 A_k 的高次项,它与重整化传播量的四级近似(图2)相联系.在三级微扰之内将它略去.利用

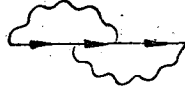


图 2

$$\langle e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \rangle = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t-\tau)) \rangle. \quad (5.6)$$

这里 $\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t-\tau)) \rangle$ 即为单粒子平均格林函数^[13],由它所满足的方程(5.1)式即可求出

$$\langle e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(t-\tau)} \rangle = \exp\{ik_{\parallel}v_{\parallel}(t-\tau) + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - k_{\perp}^2 D_{\perp}^{\mu\nu} k_{\perp}^{\nu}\}. \quad (5.7)$$

把(5.4)–(5.7)式代入(5.3)式后,利用时空均匀性,并对 τ 积分后即得到

$$D_{\perp}^{\mu\nu} = \text{Re} \left\{ \tau^{\mu\nu\rho\sigma} \left(\frac{v_{\parallel}}{B_0} \right)^2 \int d\mathbf{k} \frac{i(\mathbf{k} \times \mathbf{z}_0)^{\rho} (\mathbf{k} \times \mathbf{z}_0)^{\sigma}}{\omega - k_{\parallel}v_{\parallel} + ik_{\perp}^2 D_{\perp}^{\mu\nu} k_{\perp}^{\nu}} |A_k|^2 \right\}. \quad (5.8)$$

利用二维各向同性可写为

$$D_{\perp} = \left(\frac{v_{\parallel}}{B_0} \right)^2 \sum_k \frac{k_{\perp}^2 D_{\perp}}{(\omega - k_{\parallel}v_{\parallel})^2 + (k_{\perp}^2 D_{\perp})^2} k_{\perp}^2 |A_k|^2. \quad (5.9)$$

(5.9)式即表示出由于湍性扰动所引起的共振加宽效应^[12].对 $k_{\perp}$ 取典型值并利用低相速近似后即得到

$$D_{\perp} = \left(\frac{v_{\parallel}}{B_0} \right) |A_k| \left(1 - \frac{k_{\parallel}^2 B_0^2}{|A_k|^2 k_{\perp}^4} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.10)$$

该式给出湍性扩散的条件为

$$|A_k| \geq (k_{\parallel} B_0 / k_{\perp}^3) \text{ 或 } (\tilde{B}/B_0) \geq (k_{\parallel} / k_{\perp}). \quad (5.11)$$

由 Марков 近似求出的湍性碰撞频率为

$$\Gamma_k \sim (v_e k_{\perp}^3 / B_0) |A_k| \sim (v_e k_{\perp}) (\tilde{B}/B_0). \quad (5.12)$$

这时不难看出,用 Марков 近似导出的(5.11)和(5.12)式与由非线性色散关系导出的(4.11)和(4.12)式是相容的,即由后者估计出 $(k_{\parallel} / k_{\perp}) \sim 10^{-4}$ 导致(5.11)式给出 $(\tilde{B}/B_0) \sim 10^{-4}$ 和实验观察在量级上符合.且由(5.13)式决定出 $\Gamma_k \sim 10^6 \text{ Hz}$ 也与(4.13)式的估计值在量级上符合.这种相容性可以作为理论合理性的一个有趣的佐证.

六、高阶修正与物理讨论

下面讨论非线性色散关系的高阶修正问题.即讨论在求解(4.7)式时若把 ω_k 表达式,(4.8)式中右方第二项包括进去后所引起的修正问题.该项对色散关系的贡献相当于在(4.7)式中附加

$$\Delta = \frac{4\pi e}{c k^2} \int d v_{\parallel} v_{\parallel} G_k \sum_k \hat{L}(k, k_1) G_{k-k_1} \hat{L}(k, k_1) G_{-k_1} \hat{L}_0(k_1) f_0 |A_{k_1}|^2. \quad (6.1)$$

令

$$i\Gamma(k, k_1) = \hat{L}(k, k_1)G_{k-k_1}\hat{L}(k, k_1)|A_{k_1}|^2, \quad (6.2)$$

则有

$$i\Gamma_k = \sum_{k_1} i\Gamma(k, k_1). \quad (6.3)$$

为了估计由于 Λ 所引入的修正效应, 将仅做半定量的计算. 这时把 Γ_k 中的 $v_{\parallel}$ 用它的典型值 v_e 来代替. 在对 $v_{\parallel}$ 的积分中仍取 (ω/Γ_k) 的一级近似和 $(k_{\parallel}v_{\parallel}/\Gamma_k)$ 的二级近似并利用(4.11)式的结果, 然后得到 Λ 的实部和虚部分别为

$$\text{Re}\Lambda = \frac{\omega_{pe}^2}{c^2 k^2} \sum_{k_1} \Gamma(k, k_1)(\omega_1 - \omega_{1,n}^*) \frac{1}{\Gamma_k \Gamma_{-k_1}} \left(\frac{\omega}{\Gamma_k} - \frac{\omega_1}{\Gamma_{-k_1}} \right) \quad (6.4)$$

$$\text{Im}\Lambda = \frac{\omega_{pe}^2}{c^2 k^2} \sum_{k_1} \Gamma(k, k_1)(\omega_1 - \omega_{1,n}^*) \frac{1}{\Gamma_k \Gamma_{-k_1}}. \quad (6.5)$$

为了估计修正效应可取 $k_1 \rightarrow k$ 的典型值. 则(6.4)式表明 $\text{Re}\Lambda \rightarrow 0$, 即对于色散关系没有定性修正, 而 $\text{Im}\Lambda \rightarrow 0(\omega_{pe}^2(\omega - \omega_n^*)/c^2 k^2 \Gamma_k)$. 这时色散关系的虚部修正效应给出

$$\frac{3}{2} (k_{\parallel} v_e / \Gamma_k)^2 \sim O(1). \quad (6.6)$$

这些结果表明, $\mathcal{A}_k$ 的下一级项加入以后仅对于第四节的结果有数量上的修正而没有定性的修正. 这个情况说明对电子磁漂移波来说, 第四节中所给出的非线性色散关系的最低级计算在微扰论上是可信的. 这一点和静电漂移波的情况很不相同. 对于静电漂移波来说, 为了保证能量守恒, 在 Γ_k 和 $\mathcal{A}_k$ 的微扰级数选择上必须匹配. 在文献[15, 16]中已证明, 当 Γ_k 选择到二级微扰时(这是重整化的最低级微扰), $\mathcal{A}_k$ 必须选择到三级微扰(即必须加入(4.8)式右方第二项)才能保证能量守恒, 否则将会出现物理上不合理的结论. 而在文献[11]中已证明, 当 $i\Gamma_k$ 选择到四级微扰时, $\mathcal{A}_k$ 必须选择到五级微扰. 同时还要考虑到绝对非相干源的效应才能保证能量守恒. 但是这种限制对于电子磁漂移波并不存在. 因为容易证明, 尽管洛伦兹电漂移所诱导的横向漂移电流在感生电场中是无功的, 但是这种无功性对于它的每一个单独 k 分量均成立. 这样, 对应功的每一个图形均自身为零, 而不必通过图的微扰级数匹配选择而把各个图的贡献互相消去的问题.

与静电漂移波所不同的另一个方面是, 假定静电漂移波真有单个 k 分量无功, 那末当 $k_{\parallel} \rightarrow 0$ 时一定要要求 $D_{\perp} \rightarrow 0$. 这个性质对于电子磁漂移波并不存在(见(4.13)式). 这是因为静电波的有功电场一定和 $k_{\parallel}$ 相联系, 而电子磁漂移波的有功电场当 $k_{\parallel} \rightarrow 0$ 时也是存在的. 换句话说, 尽管 $k_{\parallel} = 0$ 时电子磁漂移波没有线性激发, 但是它却有非线性激发效应. 因此使 $k_{\parallel} \rightarrow 0$ 后的效果仅是消去了(4.11)和(5.11)式的条件, 而不影响(4.13)和(5.12)式的结论.

文献[8]中所估计的 $D_{\perp}$ 和本文用 Марков 近似所估计的 $D_{\perp}$ 在形式上很类似, 所不同之处仅在于文献[8]的 v_e 相当于本文的 Γ_k , 但是对 $(\tilde{B}/B_0)$ 的估计上有所不同. 按本文的结果应有

$$(\tilde{B}/B_0) \sim (\omega_{pe}/ck_{\perp})(\rho_e/L_n). \quad (6.7)$$

而文献[8]给出 $(\tilde{B}/B_0) \sim (\rho_e/L_n)$. 从特征值上看它比本文的估计值要小. 事实上, 仅

靠求解非线性色散关系是不能决定扩散系数定标律的; $K_{\perp}$ 的特征值也不能仅由线性理论决定。这是因为 $K_{\perp}$ 存在非线性激发机构。为此需要讨论非线性相互作用所决定的能量输运过程和绝对非相干项所决定的湍流谱问题。这将另文讨论。

参 考 文 献

- [1] N. T. Gladd, J. F. Drake, C. L. Chang, C. S. Liu, *Phys. Fluids*, **23**(1980), 1182.
- [2] H. P. Furth, *Nucl. Fusion*, **15**(1975), 487.
- [3] W. M. Tang, *Nucl. Fusion*, **18**(1978), 1089.
- [4] D. W. Ross, S. M. Mahajan, *Phys. Rev. Lett.*, **40**(1978), 324.
- [5] C. L. Chang, J. F. Drake, N. T. Gladd, C. S. Liu, *Phys. Fluids*, **23**(1980), 1998.
- [6] A. B. Rechester, M. N. Rosenbluth, *Phys. Rev. Lett.*, **40**(1978), 38.
- [7] J. F. Drake, Y. C. Lee, *Phys. Fluids*, **20**(1977), 1341.
- [8] J. F. Drake, N. T. Gladd, C. S. Liu, C. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 994.
- [9] D. A. D'Ippolito, Y. C. Lee, J. F. Drake, *Phys. Fluids*, **23**(1980), 771.
- [10] 章扬忠, 物理学报, **30**(1981), 1020.
- [11] 章扬忠, 物理学报, **30**(1981), 1565.
- [12] T. H. Dupree, *Phys. Fluids*, **10**(1967), 1049.
- [13] 章扬忠, 物理学报, **30**(1981), 584.
- [14] E. A. Новиков, *ЖЭТФ*, **47**(1964), 1919.
- [15] J. A. Krommes, *Phys. Fluids*, **23**(1980), 736.
- [16] T. H. Dupree, D. T. Tetreault, *Phys. Fluids*, **21**(1978), 425.

NON-LINEAR ELECTRON MAGNETIC-DRIFT WAVES

ZHANG YANG-ZHUNG

(Southwestern Institute of Physics, China)

ABSTRACT

In this paper, the electron magnetic-drift waves have been treated by the renormalization theory in the drift approximation with shear-free magnetic field, and its relations with the anomalous electron transport on Tokamak's analyzed. The resultant diffusion coefficient $D_{\perp} \sim (\omega_{pe} T / e B_0 L_n k_{\perp}^2)$ roughly agrees with the present Tokamak experiments.

约束系统的变换性质

李 子 平

(新疆大学物理系)

1981 年 4 月 29 日收到

提 要

受约束的系统,它的运动可用非独立的态函数来描述.在约束系统的时空坐标和态函数作无穷小变换下,考虑到作用量和约束方程的变化,导致了普遍的变换结果,沿着系统运动的轨线,得到约束系统变换性质的一般方程,从而给出约束系统在变换下产生守恒律的条件,对连续系统的某些具体变换写出了其变换性质方程,在特殊情况下,变换性质方程可化为经典 Noether 定理的结果.用于经典力学作了较详细的讨论,并把 Poincaré-Cartan 不变量推广到了受约束系统.

一

对称性和守恒律有密切的联系,从对称性出发导出守恒律主要有两种方法:分析系统运动方程的对称性质^[1],或借助于变分原理的不变性所联系的 Noether 定理^[2].这个定理指出:使作用量(或拉氏量)不变(或规范变式)的无穷小变换,导致一种守恒律.近来对 Noether 定理的研究有所进展^[3],例如,研究了其逆定理^[4],将其推广到非保守力学系统^[5],作者还探讨了推广到约束系统的可能性^[6],对于非完整约束,一般地说,系统的对称变换不产生经典 Noether 定理的守恒量.对于受约束的系统,究竟在什么条件下,变换需满足什么要求,才会产生经典 Noether 定理的守恒量呢?这里继续讨论这方面的问题.

在经典的 Noether 定理中,确定系统拉氏量的态函数(力学中的广义坐标,场论中的场函数等等),是彼此独立的,用变分原理时,是作为自由变分来处理的.但是,在实际问题中,描述系统的态函数彼此间往往满足一些约束关系,例如,经典力学中的完整和非完整约束,连续介质中热力学关系的约束,场论中场函数满足的附加条件等等.这里我们仍基于变分原理来研究用非独立态函数描述的受约束系统,其运动方程由约束条件下的限制变分给出.在约束系统的时空坐标和态函数作无穷小变换下,考虑到系统作用量和约束方程的改变,我们导致了变换的普遍结果,在利用约束系统的运动方程之后,即沿着约束系统运动的轨线,得到了约束系统变换性质的普遍方程,从这个方程直接可给出约束系统存在守恒量的充分条件.对受约束的连续系统,我们写出了 Poincaré 群和内部变换群下,沿轨线的变换性质方程.文中特别以经典力学为例作了较详细的讨论,并把 Poincaré-Cartan 不变量推广到一般的受约束系统.

二

设受约束系统由非独立的态函数 $\phi^\alpha(x)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, n$) 来描述, 其中 $x = (r, ict)$, 对于有限自由度的经典力学, α 为标志广义坐标的指标, 而在场论中, α 可代表场函数的张量或旋量指标. 诸 $\phi^\alpha(x)$ 不独立是由于它们之间存在约束条件

$$G_r = G_r(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha) = 0 \quad (r = 1, 2, \dots, k < n), \quad (1)$$

其中

$$\phi_{,\mu}^\alpha \equiv \partial_\mu \phi^\alpha. \quad (2)$$

设系统的拉氏量为 $\mathcal{L}(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha)$, 系统的作用量为

$$I = \int_D \mathcal{L}(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha) d(x). \quad (3)$$

I 的泛函导数记为

$$[\mathcal{L}]_{\phi^\alpha} \equiv \frac{\delta I}{\delta \phi^\alpha} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^\alpha} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{,\mu}^\alpha} \right). \quad (4)$$

假设约束系统的运动方程是由适合约束条件(1)式的使用量(3)式取极值的态函数所决定的, 对于线性约束^[7], 此限制变分问题导致态函数 ϕ^α 适合 Euler-Lagrange 方程为

$$[\mathcal{L}^*]_{\phi^\alpha} = 0, \quad (5)$$

其中

$$\mathcal{L}^* = \mathcal{L} + \lambda_r G_r. \quad (6)$$

$\lambda_r(x)$ 为相应的拉氏乘子.

今考虑系统的作用量(3)式和约束方程(1)在变换

$$\begin{cases} x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\mu(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha, \omega_s); \\ \phi^\alpha(x) \rightarrow \phi^{\alpha'}(x') = \phi^\alpha(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha, \omega_s) \end{cases} \quad (7)$$

下的变换性质. 其中 ω_s ($s = 1, 2, \dots, l$) 为变换李群的参数, $\omega_s = 0$ 代表恒等变换, 相应于(7)式的无穷小变换为

$$\begin{aligned} \delta x_\mu &= x'_\mu - x_\mu = \xi_{\mu(s)} \omega_s; \\ \delta \phi^\alpha &= \phi^{\alpha'}(x') - \phi^\alpha(x) = \zeta_{(s)}^\alpha \omega_s, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 δx_μ , $\delta \phi^\alpha$ 均为 x_μ , ϕ^α , $\phi_{,\mu}^\alpha$ 和 ω_s 的函数.

$$\xi_{\mu(s)} = \left. \frac{\partial x_\mu(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha, \omega_s)}{\partial \omega_s} \right|_{\omega_s=0}, \quad (9)$$

$$\zeta_{(s)}^\alpha = \left. \frac{\partial \phi^\alpha(x, \phi^\alpha, \phi_{,\mu}^\alpha, \omega_s)}{\partial \omega_s} \right|_{\omega_s=0}. \quad (10)$$

设记 $\delta \phi^\alpha \equiv \phi^{\alpha'}(x) - \phi^\alpha(x)$, 那么

$$\delta \phi^\alpha = \delta \phi^\alpha - \phi_{,\nu}^\alpha \delta x_\nu = \eta_{(s)}^\alpha \omega_s, \quad (11)$$

其中

$$\eta_{(s)}^\alpha \equiv \zeta_{(s)}^\alpha - \phi_{,\nu}^\alpha \xi_{\nu(s)}. \quad (12)$$

假设在无穷小变换(8)式下, 作用量仅发生一独立积分的改变, 即假设

$$\mathcal{L}'(x', \phi^{\alpha'}, \phi_{\mu}^{\alpha'}) d(x') = \mathcal{L}(x, \phi^{\alpha}, \phi_{\mu}^{\alpha}) d(x) + \Phi(x, \phi^{\alpha}, \phi_{\mu}^{\alpha}, \omega_s) d(x). \quad (13)$$

由于描述系统的拉氏量不是唯一确定的, 拉氏量添加一散度项将导致同样的运动方程, 于是在无穷小变换下, 可能有

$$\mathcal{L}'(x', \phi^{\alpha'}, \phi_{\mu}^{\alpha'}) = \mathcal{L}(x', \phi^{\alpha'}, \phi_{\mu}^{\alpha'}) + \partial_{\mu}'(\delta Q_{\mu}), \quad (14)$$

其中 $\delta Q_{\mu} = \delta Q_{\mu}(x', \phi^{\alpha'}, \phi_{\mu}^{\alpha'}, \omega_s)$. 由于 Jacobian 为

$$\frac{\partial(x')}{\partial(x)} = 1 + \partial_{\nu}(\delta x_{\nu}). \quad (15)$$

从 (13) 和 (14) 式得

$$\left(\delta x_{\nu} \frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \delta \phi^{\alpha} \frac{\partial}{\partial \phi^{\alpha}} + \delta \phi_{\mu}^{\alpha} \frac{\partial}{\partial \phi_{\mu}^{\alpha}} + \frac{\partial(\delta x_{\nu})}{\partial x_{\nu}} \right) \mathcal{L} = \Phi - \frac{\partial(\delta Q_{\nu})}{\partial x_{\nu}}. \quad (16)$$

在变分 (8) 式下, 导致作用 I 的变分为^[8]

$$\delta I = \int_D [\mathcal{L}]_{\phi^{\alpha} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s} d(x) + \int_D \partial_{\nu} \left[\mathcal{L} \xi_{\nu(s)} \omega_s + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\nu}^{\alpha}} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s + \delta Q_{\nu} \right] d(x). \quad (17)$$

在无穷小变换下, 假设 $\Phi, \delta Q_{\nu}$ 关于参数 ω_s 是线性的,

$$\Phi = \Phi_{(s)}(x, \phi^{\alpha}, \phi_{\mu}^{\alpha}) \omega_s, \quad (18)$$

$$\delta Q_{\nu} = \delta Q_{\nu(s)}(x, \phi^{\alpha}, \phi_{\mu}^{\alpha}) \omega_s. \quad (19)$$

由假设 (13) 式, 得

$$\int_D [\mathcal{L}]_{\phi^{\alpha} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s} d(x) + \int_D \left\{ \partial_{\nu} \left[\mathcal{L} \xi_{\nu(s)} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\nu}^{\alpha}} \eta_{(s)}^{\alpha} + \delta Q_{\nu(s)} \right] - \Phi_{(s)} \right\} \omega_s d(x) = 0. \quad (20)$$

设约束方程 (1) 在无穷小变换 (8) 式下的改变为

$$\delta G_r = \Psi_r = \Psi_{r(s)}(x, \phi^{\alpha}, \phi_{\mu}^{\alpha}) \omega_s. \quad (21)$$

由于 (11) 式, 以及

$$\delta G_r = \frac{\partial G_r}{\partial x_{\mu}} \delta x_{\mu} + \frac{\partial G_r}{\partial \phi^{\alpha}} \delta \phi^{\alpha} + \frac{\partial G_r}{\partial \phi_{\mu}^{\alpha}} \delta \phi_{\mu}^{\alpha}, \quad (22)$$

$$\delta \phi_{\mu}^{\alpha} = \bar{\delta} \phi_{\mu}^{\alpha} + \phi_{\mu\nu}^{\alpha} \delta x_{\nu}, \quad (23)$$

$$\bar{\delta}(\phi_{\mu}^{\alpha}) = (\bar{\delta} \phi^{\alpha})_{,\mu}. \quad (24)$$

这样, 由 (8), (11), (22)–(24) 式, 可将 (21) 式写为

$$\frac{\partial G_r}{\partial \phi^{\alpha}} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s + \frac{\partial G_r}{\partial \phi_{\mu}^{\alpha}} \eta_{(s),\mu}^{\alpha} \omega_s = (\Psi_{r(s)} + K_{r(s)}) \omega_s, \quad (25)$$

其中

$$K_{r(s)} = - \left[G_{r,\mu} \xi_{\mu(s)} + \frac{\partial G_r}{\partial \phi^{\alpha}} \phi_{\mu}^{\alpha} \xi_{\mu(s)} + \frac{\partial G_r}{\partial \phi_{\mu}^{\alpha}} \phi_{\mu\nu}^{\alpha} \xi_{\nu(s)} \right]. \quad (26)$$

用 $\lambda_r(x)$ 乘 (25) 式求和后积分, 注意到 (24) 式, 施行分部积分后, 得

$$\begin{aligned} & \int_D \left\{ [\lambda_r G_r]_{\phi^{\alpha} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s} + \partial_{\mu} \left[\frac{\partial(\lambda_r G_r)}{\partial \phi_{\mu}^{\alpha}} \eta_{(s)}^{\alpha} \omega_s \right] \right\} d(x) \\ &= \int_D \lambda_r (\Psi_{r(s)} + K_{r(s)}) \omega_s d(x). \end{aligned} \quad (27)$$

将 (20) 式与 (27) 式相加, 得

$$\int_D [\mathcal{L}^*]_{\psi^a} \eta_{(s)}^a \omega_s d(x) + \int_D \left\{ \partial_\mu \left[\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a + \mathcal{L} \xi_{\mu(s)} + \delta Q_{\mu(s)} \right] - \Phi_{(s)} - \lambda_r (\Psi_{r(s)} + K_{r(s)}) \right\} \cdot \omega_s d(x) = 0. \quad (28)$$

(28) 式就是约束系统的时空坐标和态函数在无穷小变换下, 由于作用量和约束方程的改变所导致的普遍变换结果.

在线性约束下, 系统的运动适合方程 (5), 这样, 沿着系统运动的“轨线”(“轨线”适合方程 (5)), 得到约束系统在变换 (8) 式下的一个直接结果

$$\int_D \left\{ \partial_\mu \left[\left(\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a + \mathcal{L} \xi_{\mu(s)} + \delta Q_{\mu(s)} \right] - \Phi_{(s)} - \lambda_r (\Psi_{r(s)} + K_{r(s)}) \right\} \omega_s d(x) = 0. \quad (29)$$

由于此关系对任何区域均适用, 并且李群的参数是彼此独立的, 从 (29) 式得沿约束系统的轨线, 在变换 (8) 式下有下列变换性质:

$$\partial_\mu \left[\left(\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a + \mathcal{L} \xi_{\mu(s)} + \delta Q_{\mu(s)} \right] = \Phi_{(s)} + \lambda_r (\Psi_{r(s)} + K_{r(s)}). \quad (30)$$

由 (28) 式可知, (30) 式和系统的运动方程 (5) 是等效的. 在经典的 Noether 定理中也有类似的泛等价定理^[3]. 假如在变换 (8) 式下, 系统的作用量 (3) 式和约束条件 (1) 式均不变, 即 $\Phi_{(s)} = 0$, $\Psi_{r(s)} = 0$, 即变换为约束系统的对称变换, 那么 (30) 式就化为约束系统推广的 Noether 定理^[9]; 假如系统不受约束, $\lambda_r = 0$, 在变换 (8) 式下, 系统的作用量不变, $\Phi_{(s)} = 0$, 那么 (30) 式就化为经典的 Noether 定理.

三

约束系统在变换 (8) 式下沿系统“轨线”导致的普遍结果 (30) 式, 它反映了约束系统在变换下的性质, 虽然在对称变换下可得到推广的 Noether 定理, 由于约束存在, 一般说来, 仍然没有经典形式的 Noether 定理^[9]. 对于受约束系统, 究竟需要满足什么条件或者选取什么样的变换才可以导致经典形式的 Noether 守恒律呢? 从 (21), (22) 和 (26) 式直接可算得

$$\Psi_{r(s)} + K_{r(s)} = \frac{\partial G_r}{\partial \psi^a} \eta_{(s)}^a + \frac{\partial G_r}{\partial \psi_{,\mu}^a} \eta_{(s),\mu}^a. \quad (31)$$

将 (31) 式代入 (30) 式中, 简化后得

$$\begin{aligned} & \partial_\mu \left[\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a + \mathcal{L} \xi_{\mu(s)} + \delta Q_{\mu(s)} \right] \\ &= \Phi_{(s)} + \lambda_r \left[\frac{\partial G_r}{\partial \psi^a} - \partial_\mu \left(\frac{\partial G_r}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \right] \eta_{(s)}^a - (\partial_\mu \lambda_r) \left(\frac{\partial G_r}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a. \end{aligned} \quad (32)$$

如果

$$\Phi_s + \lambda_r \left[\frac{\partial G_r}{\partial \psi^a} - \partial_\mu \left(\frac{\partial G_r}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \right] \eta_{(s)}^a - (\partial_\mu \lambda_r) \left(\frac{\partial G_r}{\partial \psi_{,\mu}^a} \right) \eta_{(s)}^a = 0, \quad (33)$$

那么 (32) 式就给出经典形式的 Noether 定理

$$\partial_\mu \left[\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\mu^\alpha} \right) \eta_{(s)}^\alpha + \mathcal{L} \xi_{\mu(s)} + \delta Q_{\mu(s)} \right] = 0. \quad (34)$$

(33) 式为约束系统在变换 (8) 式下可导致经典 Noether 守恒律的一般条件, 即如能选取由 $\xi_{\mu(s)}$ 和 $\zeta_{(s)}^\alpha$ 生成的变换使 (33) 式满足, 则沿着系统运动的“轨线”, 此变换将产生经典的 Noether 守恒律.

假使系统的作用量在变换 (8) 式下保持不变, $\Phi_{(s)} = 0$, 我们可以给出适合条件 (33) 式的一些特殊情况, 例如

1) 线性约束方程 (1) 的 G_r 和变换中的 $\eta_{(s)}^\alpha$ 在适合

$$[G_r]_{\phi^\alpha} = 0, \quad (35)$$

$$\frac{\partial G_r}{\partial \phi_\mu^\alpha} \eta_{(s)}^\alpha = 0 \quad (36)$$

时, 约束系统在变换 (8) 式下能导致经典 Noether 守恒律.

2) 线性约束方程 (1) 的 G_r 中不含 ϕ_μ^α , 且 G_r 在内部对称变换 (时空坐标不变 $\xi_{\mu(s)} = 0$) 下保持不变, 即当 G_r 中不含 ϕ_μ^α 时, 约束系统在内部对称变换下可导致经典形式的 Noether 守恒律.

四

下面讨论约束系统在几种具体变换下所导致的结果. 假设在变换下系统的作用量不变.

1. 平移变换

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\mu + \xi_{\mu(s)} \omega_s. \quad (37)$$

变换 (37) 式代表系统的刚性移动.

$$\delta \phi^\alpha = \phi^{\alpha'}(x') - \phi^\alpha(x) = 0, \quad (38)$$

$$\bar{\delta} \phi^\alpha = \phi^{\alpha'}(x) - \phi^\alpha(x) = -\phi_\mu^\alpha \xi_{\mu(s)} \omega_s. \quad (39)$$

由 (32) 式得

$$\partial_\nu T_{\mu\nu} = H_\mu, \quad (40)$$

其中

$$T_{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\nu^\alpha} \phi_\mu^\alpha - \delta_{\mu\nu} \mathcal{L}, \quad (41)$$

$$H_\mu = \lambda_r \left[\frac{\partial G_r}{\partial \phi^\alpha} - \partial_\nu \left(\frac{\partial G_r}{\partial \phi_\nu^\alpha} \right) \right] \phi_\mu^\alpha - (\partial_\nu \lambda_r) \frac{\partial G_r}{\partial \phi_\nu^\alpha} \phi_\mu^\alpha. \quad (42)$$

(41) 式的 $T_{\mu\nu}$ 可解释为连续系统的能量动量张量密度. 假如描述系统的态函数是彼此独立的, 它们之间不存在约束 ($\lambda_r = 0$), 在对称变换下就给出能量动量张量守恒, $\partial_\nu T_{\mu\nu} = 0$. 对于受约束的系统, 在 $H_\mu = 0$ 时, 才给出能量动量张量守恒, 例如, 假使约束条件 G_r 中不含 ϕ_μ^α (有限约束) 并且 $\frac{\partial G_r}{\partial \phi^\alpha} \phi_\mu^\alpha = 0$ 时, 变换如保持系统的作用量不变, 此时 (40) 和 (42) 式仍导致系统的能量动量守恒.

2. 洛伦兹变换

在变换

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\mu + \varepsilon_{\mu\nu} x_\nu \quad (43)$$

下,

$$\delta\phi^\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu} D_{\mu\nu}^{\alpha\beta} \phi^\beta \quad (44)$$

或

$$\delta\phi = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu} \hat{D}_{\mu\nu} \phi. \quad (45)$$

如果 ϕ 是场论中的场函数, $\hat{D}_{\mu\nu}$ 依赖于 ϕ 为洛伦兹群的张量表示或旋量表示. 由 (44) 式,

$$\bar{\delta}\phi^\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu} D_{\mu\nu}^{\alpha\beta} \phi^\beta - \varepsilon_{\mu\nu} \phi^\alpha x_\nu \quad (46)$$

或

$$\bar{\delta}\phi^\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu} (D_{\mu\nu}^{\alpha\beta} + x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu) \phi^\beta, \quad (47)$$

$$\bar{\delta}\phi = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu} (\hat{D}_{\mu\nu} + x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu) \phi. \quad (48)$$

假如在洛伦兹变换下, 系统的作用量不变, 那么, 由 (32) 式, 有

$$\partial_\nu J_{\rho\mu\nu} = H_{\rho\mu}, \quad (49)$$

其中

$$J_{\rho\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{,\nu}} \hat{D}_{\rho\mu} \phi + x_\rho T_{\mu\nu} - x_\mu T_{\rho\nu}, \quad (50)$$

$$\begin{aligned} H_{\rho\mu} = & \lambda_r \left[\frac{\partial G_r}{\partial \phi} - \partial_\nu \left(\frac{\partial G_r}{\partial \phi_{,\nu}} \right) \right] (\hat{D}_{\rho\mu} + x_\rho \partial_\mu - x_\mu \partial_\rho) \phi \\ & - (\partial_\mu \lambda_r) \left(\frac{\partial G_r}{\partial \phi_{,\nu}} \right) (\hat{D}_{\rho\mu} + x_\rho \partial_\mu - x_\mu \partial_\rho) \phi. \end{aligned} \quad (51)$$

(50) 式中的 $J_{\rho\mu\nu}$ 可解释为系统的动量矩张量密度, (49) 式给出了约束系统在洛伦兹变换下所导致的动量矩张量密度所适合的关系.

3. 态函数内部变换

考虑时空坐标不变, 而描述系统的态函数作如下变换:

$$\begin{aligned} x_\mu & \rightarrow x'_\mu = x_\mu; \\ \phi^\alpha(x) & \rightarrow \phi'^\alpha(x) = \phi^\alpha(x) + \xi_{(\alpha)}^a \omega_a. \end{aligned} \quad (52)$$

此时 $\xi_{\mu(\alpha)} = 0$. 假使变换 (52) 式保持系统的作用量不变, 那么由 (32) 式, 有

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'^\alpha_{,\mu}} \xi_{(\alpha)}^a \right] = \lambda_r \left[\frac{\partial G_r}{\partial \phi^\alpha} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'^\alpha_{,\mu}} \right) \right] \xi_{(\alpha)}^a - (\partial_\mu \lambda_r) \frac{\partial G_r}{\partial \phi'^\alpha_{,\mu}} \xi_{(\alpha)}^a. \quad (53)$$

如果约束条件 G_r 中不含 $\phi^\alpha_{,\mu}$, 且变换保持作用量和约束条件均不变, 即有

$$\frac{\partial G_r}{\partial \psi^a} \zeta_{(r)}^a = 0. \quad (54)$$

那么(53)式就化为经典 Noether 定理的结果.

五

下面以经典力学为例,说明上述结果的应用.

设用非独立广义坐标 $q_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 所描述的动力学系统,其拉氏函数为 $\mathcal{L}(t, q_i, \dot{q}_i)$, 此系统的作用量为

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q_i, \dot{q}_i) dt. \quad (55)$$

假设此动力学系统的广义坐标 q_i 除了受完整约束

$$G_r = G_r(t, q_i) = 0 \quad (r = 1, 2, \dots, k, k < n) \quad (56)$$

的限制外,还受线性非完整约束

$$G_s = a_{si} \dot{q}_i + b_s = 0 \quad (s = 1, 2, \dots, l, k + l < n) \quad (57)$$

的限制,此系统的动力学方程为

$$\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} \right) + \mu_s a_{si} = 0, \quad (58)$$

其中

$$\mathcal{L}^* = \mathcal{L} + \lambda_r G_r. \quad (59)$$

λ_r 和 μ_s 为相应的拉氏乘子.

今考虑(55), (56) 和(57) 式在无穷小变换

$$t \rightarrow t' = t + \delta t, \quad q_i(t) \rightarrow q'_i(t') = q_i(t) + \delta q_i(t) \quad (60)$$

下的性质. 为明确起见,不妨设

$$\delta t = \varepsilon f(t, q_i, \dot{q}_i), \quad \delta q_i = \varepsilon F_i(t, q_i, \dot{q}_i). \quad (61)$$

假设在变换(6)式下,有

$$\mathcal{L}'(t', q'_i, \dot{q}'_i) dt' = \mathcal{L}(t, q_i, \dot{q}_i) dt + \delta \Phi(t, q_i, \dot{q}_i) dt. \quad (62)$$

描述系统的拉氏函数 $\mathcal{L}$ 可以添加时间的全微分项, 于是在无穷小变换(60)式下,可能有

$$\mathcal{L}'(t', q'_i, \dot{q}'_i) = \mathcal{L}(t', q'_i, \dot{q}'_i) + \frac{d}{dt'} (\delta \Omega), \quad (63)$$

其中 $\delta \Omega = \delta \Omega(t', q'_i, \dot{q}'_i)$, 由(62)和(63)式得

$$\left[\delta t \frac{\partial}{\partial t} + \delta q_i \frac{\partial}{\partial q_i} + \delta \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial}{\partial t} (\delta t) \right] \mathcal{L} = \delta \Phi - \frac{d}{dt} (\delta \Omega). \quad (64)$$

在变换(60)式下,根据(62)式,有^[7]

$$\begin{aligned} & \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] [\delta q_i - \dot{q}_i \delta t] \right. \\ & \quad \left. + \frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \delta \Omega \right] - \delta \Phi \right\} dt = 0. \end{aligned} \quad (65)$$

在变换(60)式下,假设约束方程(56)的改变为

$$\delta G_r = \frac{\partial G_r}{\partial t} \delta t + \frac{\partial G_r}{\partial q_i} \delta q_i = N_r, \quad (66)$$

由于

$$\delta q_i = \bar{\delta} q_i + \dot{q}_i \delta t, \quad (67)$$

(66) 式又可写为

$$\frac{\partial G_r}{\partial q_i} \bar{\delta} q_i = N_r - \left[\frac{\partial G_r}{\partial t} + \dot{q}_i \frac{\partial G_r}{\partial q_i} \right] \delta t = K_r, \quad (68)$$

其中

$$K_r = \frac{\partial G_r}{\partial q_i} \delta q_i - \dot{q}_i \frac{\partial G_r}{\partial t} \delta t. \quad (69)$$

在变换 (60) 式下, 假设约束方程 (57) 的改变为

$$\delta G_s = \delta a_{si} \dot{q}_i + a_{si} \delta \dot{q}_i + \delta b_s = N_s, \quad (70)$$

由于 $\frac{d}{dt}(\bar{\delta} q_i) = \bar{\delta} \dot{q}_i$, (70) 式又可写为

$$a_{si} \bar{\delta} q_i = \int_0^t [N_s + a_{si} \bar{\delta} q_i - \delta a_{si} \dot{q}_i - a_{si} \dot{q}_i \delta t - \delta b_s] dt + c_s, \quad (71)$$

即

$$a_{si} \bar{\delta} q_i = K_s, \quad (72)$$

其中

$$K_s = \int_0^t (a_{si} \bar{\delta} q_i + a_{si} \bar{\delta} \dot{q}_i) dt + c_s, \quad (73)$$

$$c_s = a_{si} \bar{\delta} q_i|_{t=0}. \quad (74)$$

用 $\lambda_r(t)$ 乘 (68) 式求和后在 $[t_1, t_2]$ 上积分, 同时用 μ_s 乘 (72) 式求和后在 $[t_1, t_2]$ 上积分, 将所得结果与 (65) 式相加, 即得作用量 (55) 式和约束方程 (56), (57) 在变换 (60) 式下导致的普遍关系式

$$\int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} \right) + \mu_s a_{si} \right] (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \delta Q \right] \right\} dt = \int_{t_1}^{t_2} (\delta \Phi + \lambda_r K_r + \mu_s K_s) dt. \quad (75)$$

根据系统的动力学方程 (58), 即沿质点组运动的轨线, 得到

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \delta Q \right] dt \\ = \int_{t_1}^{t_2} (\delta \Phi + \lambda_r K_r + \mu_s K_s) dt \end{aligned} \quad (76)$$

或

$$\frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \delta Q \right] = \delta \Phi + \lambda_r K_r + \mu_s K_s. \quad (77)$$

(77) 式是系统的作用量和约束方程在变换 (60) 式下, 由于系统的动力学方程 (58) 所直接产生的结果. 从 (75) 式可见, (77) 式与系统的动力学方程 (58) 是等效的.

假如变换 (60) 式为约束系统的对称变换, 即此变换保持系统的作用量和约束条件不变, 那么, (77) 式就化为经典力学约束系统的推广 Noether 定理^[6]. 如果系统不受约束

($\lambda_r = 0, \mu_s = 0$), (77) 式就化为经典形式的 Noether 定理.

即使是在约束系统的对称变换下, 由于约束的作用, 一般说 (77) 式仍不能给出经典形式的 Noether 定理^[6]. 这里我们来讨论约束系统在变换下能导致经典 Noether 守恒律的条件. 如果在变换 (60) 式下, 存在函数 $\delta Q_1(t, q_i, \dot{q}_i, \varepsilon)$, 使得

$$\delta \Phi = - \frac{d}{dt} (\delta Q_1), \quad (78)$$

并且有

$$\lambda_r K_r + \mu_s K_s = 0. \quad (79)$$

那么, 由于 $\mathcal{L}^*$ 中的 G_r 不含 $\dot{q}_i$, 根据 (77) 式就有

$$\frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) + \delta \Lambda \right] = 0, \quad (80)$$

其中 $\delta \Lambda = \delta Q_1 + \delta Q_2$. (80) 式即为经典的 Noether 守恒律.

作为守恒条件的一种特殊情况, 可以指出, 如果在变换 (60) 式下, 系统的作用量不变 ($\delta \Phi = 0$), 而由 (64) 式有相应的 δQ 存在, 同时由 (61), (69), (73) 和 (74) 式, 假设又有

$$\frac{\partial G_r}{\partial q_i} (F_i - \dot{q}_i f) = 0, \quad (81)$$

$$a_{si} (F_i - q_i f) + a_{si} \frac{d}{dt} (F_i - \dot{q}_i f) = 0, \quad (82)$$

$$a_{si} (F_i - \dot{q}_i f)|_{t=0} = 0. \quad (83)$$

那么 (78) 和 (79) 式就自动满足. 从而约束系统在变换 (60) 式下将导致经典形式的 Noether 守恒律. (82) 式和 (83) 式可合并为

$$a_{si} (F_i - \dot{q}_i f) = 0. \quad (84)$$

由 (61) 式可知, (81) 式和 (84) 式恰好是定时变分满足了虚位移条件. 这样, 对于一个用非独立坐标描述的受约束动力学系统, 如果能选取某种变换 (60) 式, 使系统的作用量不变, 并且变换中的 F_i 和 f 满足方程 (81) 和 (84) 式. 即这个定时无穷小变换适合虚位移的约束条件, 那么, 根据约束系统的变换性质, 沿质点组运动轨线, 此变换就导致经典的 Noether 守恒量, 这时的守恒量不再与约束条件有关. 我们已经指出, 对于仅受有限约束的动力学系统, 在 $f = 0$ 的对称变换下, 将产生经典 Noether 定理的守恒量^[6], 正好是这里结果的一个特例.

适合 (81) 和 (84) 式的函数 F_i 和 f , 形成的变换 (60) 式, 如保持系统的作用量不变, 此时系统将存在经典的 Noether 守恒量. 条件 (81) 和 (84) 式只是系统存在上述守恒量的充分条件, 它还不能视为约束系统 Noether 定理之逆.

下面通过一些熟知的例子来说明上述结果.

例 1. 有心力场中光滑旋转椭球面上运动的质点.

拉氏函数和完整约束条件为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2) - V(r) \quad (r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2), \quad (85)$$

$$G = a^2(x_1^2 + x_2^2) + b^2 x_3^2 - R^2 = 0. \quad (86)$$

绕 x_3 轴的转动变换, $F_1 = x_2, F_2 = -x_1, F_3 = f = 0$, 此变换保持了系统的拉氏函数 $\mathcal{L}$ 不变, $\delta\Phi = \delta Q = 0$, 并且变换中的 F_i 和 f 适合条件 (81) 式, 根据 (80) 式, 质点沿 x_3 轴的动量矩守恒.

绕 x_1 轴的转动变换, $F_1 = 0, F_2 = x_3, F_3 = -x_2, f = 0$, 此变换保持了系统的拉氏函数不变, $\delta\Phi = \delta Q = 0$, 但变换中的 F_i 和 f 不适合条件 (81) 式, 此时 (77) 式给出

$$\frac{d}{dt}(x_3 p_2 - x_2 p_3) = x_3 \left(\lambda \frac{\partial G}{\partial x_2} \right) - x_2 \left(\lambda \frac{\partial G}{\partial x_3} \right). \quad (87)$$

此即质点的动量矩定理在 x_1 方向的分量式.

时间平移变换 $F_i = 0 (i = 1, 2, 3), f = 1$. 此变换保持了系统的拉氏函数不变, $\delta\Phi = \delta Q = 0$, 变换中的 F_i 和 f 适合条件 (81) 式, 根据 (80) 式得系统的机械能守恒.

沿 x_1 方向的平移变换 $F_1 = 1, F_2 = F_3 = f = 0$. 此时条件 (81) 式不满足, 拉氏函数也是非不变的, 由 (77) 式给出 x_1 方向的动量定理

$$m\ddot{x}_1 = \lambda \frac{\partial G}{\partial x_1} - \frac{\partial V}{\partial x_1}. \quad (88)$$

沿 x_1 轴方向的伽里略变换, $F_1 = -t, F_2 = F_3 = f = 0$, 由 (77) 式仍给出 (88) 式. 变换 $F_1 = x_2 t, F_2 = -x_1 t, F_3 = f = 0$, 此时条件 (81) 式满足, 由 (80) 式给出质点沿 x_3 轴的动量矩守恒.

例 2. 铁环沿斜面无滑动地滚下.

拉氏函数和约束方程分别为^[10]

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} M \dot{x}^2 + \frac{1}{2} M r^2 \dot{\theta}^2 - M g(l - x) \sin \varphi, \quad (89)$$

$$G = \dot{x} - r\dot{\theta} = 0. \quad (90)$$

沿 x 方向的伽里略变换, $F_x = -t, F_\theta = f = 0$, 这时

$$\delta A = \varepsilon \left(Mx + \frac{1}{2} M g t^2 \sin \varphi \right).$$

变换中的 F_i 和 f 不满足 (84) 式. 由 (77) 式得

$$M\ddot{x} = \mu + mg \sin \varphi. \quad (91)$$

变换 $F_x = \dot{x}, F_\theta = \dot{\theta}, f = 0$, 满足条件 (84) 式, 又

$$\delta A = -\varepsilon \left(\frac{1}{2} M \dot{x}^2 + \frac{1}{2} M r^2 \dot{\theta}^2 + mgx \sin \varphi \right). \quad (92)$$

根据 (80) 式得系统的机械能守恒.

同样, 变换 $F_x = x, F_\theta = \theta, f = 0$ 仍可导致系统的机械能守恒.

时间平移变换 $F_x = F_\theta = 0, f = 1$, 保持了系统的拉氏函数不变, $\delta\Phi = \delta Q = 0$, 并且变换中的 F_i 和 f 适合条件 (84) 式, 根据 (80) 式仍得系统的机械能守恒.

例 3. 质量为 m_1, m_2 的两质点, 由长为 l 的轻刚杆联结, 此质点组仅能在铅直平面内运动, 且杆中心点的速度必须沿杆方向.

此系统的拉氏函数和约束条件分别为^[11]

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m_1(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2) + \frac{1}{2} m_2(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2) - m_1 g y_1 - m_2 g y_2, \quad (93)$$

$$G_1 = \frac{1}{2} [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 - l^2] = 0, \quad (94)$$

$$G_2 = (x_2 - x_1)(\dot{y}_1 + \dot{y}_2) - (y_2 - y_1)(\dot{x}_1 + \dot{x}_2) = 0. \quad (95)$$

沿 x 轴的平移变换 $F_x = 1$, $F_y = f = 0$, 此变换使 $\mathcal{L}$, G , G_2 均保持不变, 即此变换为约束系统的对称变换, $\delta\Phi = \delta Q = 0$, 但变换中的 F_i 和 f 不适合条件 (84) 式, 由 (69), (73), (74), (77) 式可得

$$\frac{d}{dt} \sum m_i x_i = 2\mu(y_1 - y_2). \quad (96)$$

(96) 式为系统动力学方程的直接结果. 这个例子又一次说明, 沿 x 轴的平移变换虽然是约束系统的对称变换, 但它不满足虚位移条件, 因而变换不产生经典的守恒量.

沿 x 方向的伽里略变换, $F_x = -t$, $F_y = f = 0$, 此时 $\delta A = \epsilon \sum m_i x_i$, 由 (77) 式仍得到 (96) 式.

绕 z 轴的转动变换 $F_x = y$, $F_y = -x$, $f = 0$, 此时 (77) 式给出系统沿 z 轴的动量矩定理的分量式.

六

现在讨论约束系统的 Poincaré-Cartan 不变量.

假设动力学系统除了受完整约束条件 (56) 式的限制外, 还受线性非完整约束条件 (57) 式的限制. 设在变换

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t + \delta t(\alpha), \\ q_i(t) &\rightarrow q'_i(t', \alpha) = q_i(t) + \delta q_i(t, \alpha), \\ \dot{q}_i(t) &\rightarrow \dot{q}'_i(t', \alpha) = \dot{q}_i(t) + \delta \dot{q}_i(t, \alpha) \end{aligned} \quad (97)$$

下, 条件 (56), (57) 式的变化分别适合 (68) 式和 (72) 式. (97) 式中的 α 为参数,

$$q'_i(t, 0) = q_i(t), \quad \dot{q}'_i(t, 0) = \dot{q}_i(t). \quad (98)$$

由 (68) 式, 有

$$\int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial(\lambda_r G_r)}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial(\lambda_r G_r)}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) - \lambda_r K_r \right\} dt = 0. \quad (99)$$

由 (72) 式, 有

$$\int_{t_1}^{t_2} [\mu_{,i} a_{,ii} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) - \mu_{,i} K_{,i}] dt = 0. \quad (100)$$

作用量 (55) 式在变换 (97) 式下的改变为

$$\begin{aligned} \delta I = I'(\alpha) \delta \alpha &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) \right] \right\} dt. \end{aligned} \quad (101)$$

将 (99), (100) 和 (101) 式相加, 得

$$\delta I = I'(\alpha) \delta \alpha = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} \right) + \mu_{,i} a_{,ii} \right] (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) \right\} dt$$

$$+ \frac{d}{dt} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}^*}{\partial \dot{q}_i} (\delta q_i - \dot{q}_i \delta t) - \lambda_r K_r - \mu_s K_s \right] \} dt. \quad (102)$$

因此,沿着质点系运动的轨线,由动力学方程(58),注意到 $\mathcal{L}^*$ 中的 G_r 不含 $\dot{q}_i$,于是得

$$\delta l = l'(\alpha) \delta \alpha = \left[\left(\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i - \lambda_r K_r - \mu_s K_s \right]^2. \quad (103)$$

设在广义坐标、广义速度和时间所张成的 $2n+1$ 维空间中,有一条满足约束方程(56)和(57)的闭合曲线 c_1 . (由于约束条件,曲线 c_1 实际上是在某子空间中), c_1 的方程设为

$$q_i = q_i'(\alpha), \quad \dot{q}_i = \dot{q}_i'(\alpha), \quad t = t_1(\alpha). \quad (104)$$

这里 $\alpha=0$ 和 $\alpha=l$ 是曲线上的同一点,过 c_1 上的任一点,有一条适合方程(58)的质点系的轨线,过 c_1 上的每一点的轨线构成一封闭的轨线管

$$q_i = q_i(t, \alpha), \quad \dot{q}_i = \dot{q}_i(t, \alpha), \quad (105)$$

其中

$$q_i(t, 0) = q_i(t, l), \quad \dot{q}_i(t, 0) = \dot{q}_i(t, l). \quad (106)$$

在此轨线管上任取一闭曲线 c_2 ,使它包围此轨线管,并和轨线管母线仅交于一点. 曲线 c_2 的方程设为

$$q_i = q_i^2(\alpha), \quad \dot{q}_i = \dot{q}_i^2(\alpha), \quad t = t_2(\alpha). \quad (107)$$

将(103)式在 $[0, l]$ 上沿 c_1 和 c_2 积分,得

$$\oint_{c_1} \left[\left(\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i - \lambda_r K_r - \mu_s K_s \right] \\ = \oint_{c_2} \left[\left(\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i - \lambda_r K_r - \mu_s K_s \right]. \quad (108)$$

(108)式就是约束系统的推广 Poincaré-Cartan 积分不变量. 只要闭曲线 c 满足约束条件,沿质点组运动轨线,在 $t, q_i, \dot{q}_i$ 作任意变更下,有

$$\oint_c \left[\left(\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i - \lambda_r K_r - \mu_s K_s \right] = \text{不变量}. \quad (109)$$

假如变换(97)式中广义坐标的定时变分适合虚位移条件(81)和(84)式,那么(109)式就化为经典的 Poincaré-Cartan 不变量^[11]

$$\oint_c \left[\left(\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right] = \oint_c (p \delta q_i - H \delta t) = \text{不变量}. \quad (110)$$

参 考 文 献

- [1] H. H. Denman, *J. Math. Phys.*, **7**(1966), 1910; W. Sarlet, *J. Math. Phys.*, **19**(1978), 1049, 李子平, 新疆大学学报(自然科学版), (2)(1980).
- [2] P. Havas, *Helv. Phys. Acta*, **51**(1978), 293; E. A. Desloge and R. I. Karch, *Am. J. Phys.*, **45**(1977), 336.
- [3] 吴学谋, 力学与实践, (2)(1979), 54; (8)(1980), 24.
- [4] E. Candotti, C. Palmieri and B. Vitale, *Nuovo Cimento*, **70A**(1970), 233; *Am. J. Phys.* **40**(1972), 424.
- [5] B. Vujanovic, *Int. J. non-linear mech.*, **13**(1978), 185; Dj. Djukic and A. M. Straus, *J. Phys.*, **A: Math. Gen.** (GB), **13**(1980), 431.
- [6] 李子平, 自然杂志, 即将发表; 新疆大学学报(自然科学版), (1)(1981).

- [7] E. Klingbeil, *Variationsrechnung*, (1977), 226.
- [8] E. L. Hill, *Rev. Mod. Phys.*, 23(1951), 253.
- [9] 李子平, 本刊本期.
- [10] H. Goldstein, *Classical mechanics*, (1953), 43.
- [11] Ф. Р. Гатмахер, *Лекции по Аналитической Механике* (1960), §3; §18.

THE TRANSFORMATION PROPERTIES OF CONSTRAINED SYSTEM

LI ZI-PING

(Department of Physics, Xinjiang University)

ABSTRACT

The motion of constrained system may be described in terms of non-independent state functions. We considered the change of the action integral and constraint equations under the infinitesimal transformation of the time-space points and state functions of the constrained system, this leads to the general transformation result. We obtained the general equations for the transformation properties of constrained system along the trajectory of motion of that system. From these equations, the condition under which the transformation of constrained system yields conservation law can be worked out. For some specific transformations of the continuous system, we have found the equations of transformation properties. In the special cases, the general equations of transformation properties can be reduced to the results the classical Noether's theorem, The application of general results to classical mechanics is discussed in detail and the Poincare-Cartan invariant is generalized to the constrained system.

研究简报

直拉法 LiNbO_3 单晶体中的旋转生长条纹

闵乃本 洪静芬 孙政民 杨永顺

(南京大学固体物理研究所)

1981年3月14日收到

提 要

使晶体转轴与温场对称轴不一致,则在晶体弯月面内会产生随时间变化的正弦波式的温度分布.建立了晶体转速、温度起伏、表面生长条纹和内部生长条纹间的一一对应关系,从而在晶体中有意识地引入了其周期可以任意调节的旋转生长条纹.

引 言

由于旋转生长条纹具有严格的周期性,并且能够勾画出生长过程中的界面形态,故我们已经通过对旋转生长条纹的研究,揭示了生长过程中固液界面形态的演变^[1],研究了电子称重直径自控生长的 LiNbO_3 单晶体中的功率条纹^[2];特别是利用旋转生长条纹制备了具有一维周期结构的聚片多畴 LiNbO_3 单晶体,基本上实现了 LiNbO_3 的准位相匹配,提高了激光倍频转换效率达一个数量级(与同质量、等厚度的位相匹配的单畴 LiNbO_3 单晶体比较)^[3].

Witt 等人虽曾对半导体单晶体中的旋转生长层进行了深入的研究^[4],然而在氧化物晶体中,除了一些零星的报道外,尚缺乏研究,特别是有意识地引入并利用旋转生长条纹.本文简要地报道在 LiNbO_3 单晶体中关于有意识地引入的旋转生长条纹的研究结果.

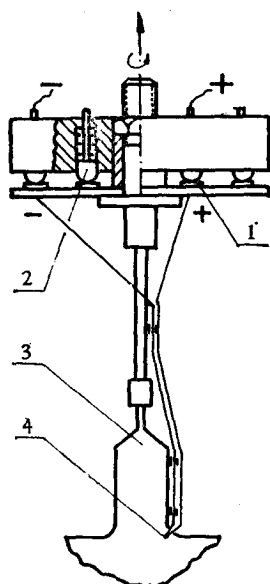


图1 旋转测温装置
1—旋转滑环; 2—弹簧触点; 3—晶体; 4—热电偶

实 验 方 法

在温场不对称或温场的对称轴与晶体旋转轴不一致的条件下,直拉法生长过程中由于晶体旋转将在固液界面处引起温度起伏,因而产生了旋转生长条纹.为了研究温场的对称性及其在晶体旋转时引起的温度起伏,并确立晶体旋转、温度起伏和生长条纹间的一一对应关系,我们设计了旋转测温装置.如图1所示.图中电偶和晶体一起旋转,所得温度信号经旋转滑环及弹簧触点传至温度记录仪.已经利用该装置测定了熔体中,弯月面内以及晶体周围气氛中的温度,研究了温场的对称性及晶体旋转引起的温度起伏.

结果与讨论

温场的对称性 实验测量表明,由于温场的不对称,晶体旋转时在固液界面处将引起温度起伏。但是这种温度起伏的形式与正弦曲线的差异较大,且其振幅不可调节。为了得到正弦式的温度起伏,以便有控制地引入生长条纹,必须研究单晶炉炉膛内温场的对称性,并且尽可能地建立具有圆柱对称性的温度分布。利用图 1 所示的测量装置,测定了电子称重直径自控的单晶炉^[2]中的温度分布。结果表明,在坩埚内液面附近,无论在气氛中、弯月面内或熔体中,其温场都不具有圆柱对称性。例如在直径 22 毫米的晶体弯月面内,温差可达 10°C 。其主要影响来自观察孔。测量表明,对电阻加热单晶炉^[2],近观察孔的一侧温度较高,而观察孔对面的温度较低。这是由于来自观察孔的辐射加热效应以及晶体的辐射屏蔽效应。将观察孔位置上移和减小观察孔面积,可使弯月面的温差降低到 1°C 以下。若发热元件(硅碳棒)的分布和阻值均匀,则能够进一步增加温度分布的对称性。温场的对称性除可利用图 1 的测温装置直接测量外,还可通过下列方式检验。在对称温场中停转生长,应能获得具有轴对称的单晶体;同时,缓慢地降温时,坩埚中的熔体将凝固成外观上反映晶体某些对称性的晶态固体,如图 2 所示。

旋转引起的温度起伏 在获得较为对称的温场后,有意识地使晶体转轴与温场对称轴不一致(在我们的设备中可通过微动螺栓来调节炉座的相对位置)。于是当旋转晶体时,在弯月面内就产生了近于正弦波的温度起伏,其典型的温度起伏曲线如图 3 所示。可以看出,温度起伏的频率与晶体转速完全一致。但温度起伏只近似于正弦曲线,这是由于我们仍然保留了观察孔因而没有完全建立圆柱对称的温场的缘故。实践表明,温场的轴



图 2 反映温场对称性的坩埚中的结晶

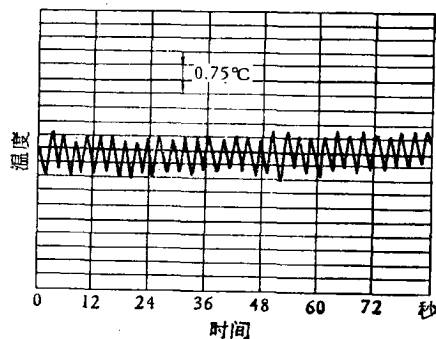


图 3 晶体旋转时电偶结于弯月面内测得的温度起伏晶体转速为 23 转/分

对称性愈好,愈易得到接近于正弦曲线的温度起伏,而晶体转轴与温场对称轴间的偏离愈大,温度起伏的振幅愈大。于是我们在直拉法生长过程中,获得了频率和振幅完全可以自由调节的近于正弦波式的温度起伏。

晶体转速、温度起伏与生长条纹间的对应关系 直拉法生长过程中突然改变转速,例如由 4 转/分改变为 13 转/分,所得结果如图 4 所示。从图 4 可以定量地看到,晶体旋转

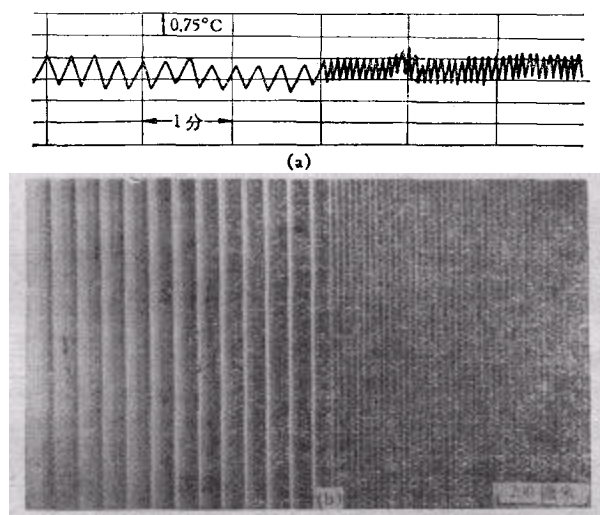


图4 晶体旋转由4转/分突变为13转/分时在弯月面内所测得的温度起伏(a)及其相应晶体的表面生长条纹(b)

的频率与温度起伏和表面生长条纹的频率完全一致。图4(b)所示的表面生长条纹实际上是晶体直径的周期性变化,这是由于弯月面内温度起伏引起径向生长速率涨落而产生的,这在金相显微镜中斜照明的条件下可清晰地观察到。为了证明所观察到的条纹确实为旋转生长条纹,在以拉速6毫米/小时,转速7.7转/分的生长过程中,先停转,然后转30圈,再停转,所得的结果如图5所示。

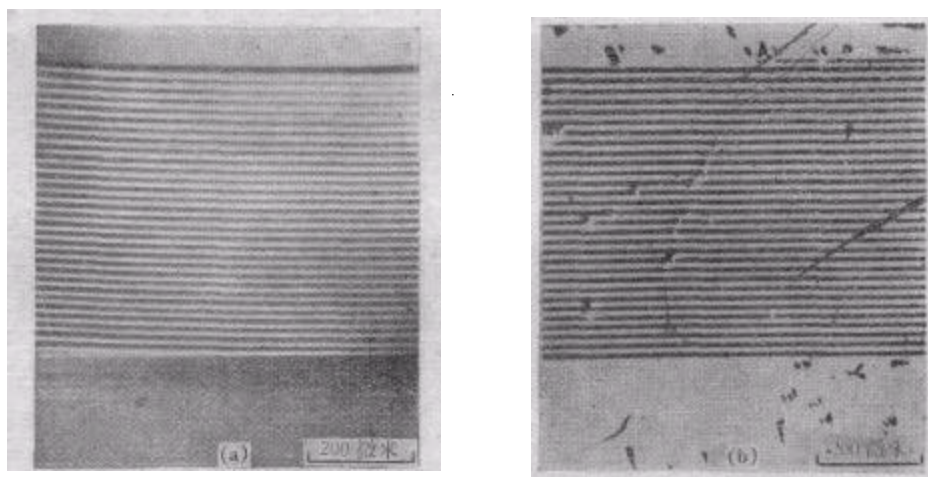


图5 表面旋转条纹(a)与内部旋转条纹(b)

从图5可以看出,在停转时确实不产生生长条纹,而由旋转产生的生长条纹(30条)与旋转圈数相符,并且表面与内部条纹完全一致。图5(b)中的内部生长条纹是通过对应于温度起伏的正负铁电畴而显示出来的,这个问题将另文讨论^[5]。

仔细观察图5所示的生长条纹的几何形态,发现表面条纹为一螺旋线,内部条纹是一螺旋面的纵截面图象;在图5(b)中的A处清晰地显示出此螺旋面的始端。

为了定量地检验旋转一周时固液界面的位移与条纹间距的关系。一方面通过千分表

和停表精确地测定拉速和转速,并经液面下降的校正,求得旋转一周的固液界面位移. 另一方面通过显微测量直接测得生长条纹的间距. 其结果列于表 1, 可以看出两者大体符合. 实验结果表明,只有在生长过程中晶体直径和固液界面形状都严格保持不变,两者的测量结果才能相符得较好.

表 1 旋转条纹的测量结果

	z 轴生长(微米) (15 条的平均值)	x 轴生长(微米) (24 条的平均值)
生长条纹间距	7.1	14.9
旋转一周的界面位移	7.3	14.1

结论 在具有圆柱对称的温场中,有意识地使晶体旋转轴与温场对称轴不一致,在弯月面内可产生近于正弦波式的温度起伏(这在定量地研究生长速率对于温度起伏的动力学响应时可简化理论分析),且温度起伏的频率和振幅可通过转速和偏心距离而任意调节. 实验结果还表明,由此成功地在晶体表面和内部引入了具有严格周期性的旋转生长条纹.

参 考 文 献

- [1] 闵乃本、洪静芬、冯端,科学通报, **25** (1980), 256.
- [2] 洪静芬、孙政民、杨永顺、闵乃本,物理, **9**(1980), 5.
- [3] 冯端、闵乃本、洪静芬等, *Appl. Phys. Lett.*, **37** (1980), 607.
- [4] A. F. Witt and H. C. Gatos, *J. Electrochem. Soc.*, **115** (1968), 607.
- [5] 闵乃本、洪静芬、冯端,物理学报,待发表.

ROTATIONAL STRIATIONS IN CZOCHRALSKI-GROWN LiNbO_3 SINGLE CRYSTALS

MING NAI-BEN HONG JING-FEN SUN ZHENG-MIN YANG YONG-SHUN

(*Institute of Solid Physics, Nanjing University*)

ABSTRACT

We intentionally render the rotational axis of growing crystal to deviate from the symmetry axis of the temperature field, the temperature fluctuations with sinusoidal form in meniscus are produced. The one-to-one correspondance between speed of crystal revolution temperature fluctuations, surface growth striations and interior growth striations have been demonstrated.