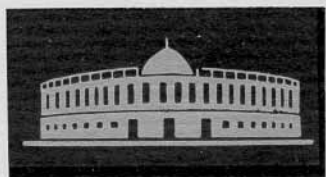


ISSN 0367-2026

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ
ЧАСТИЦ
И АТОМНОГО
ЯДРА



ВЫПУСК

1996 том 27 выпуск 2



JOINT INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH

PHYSICS
OF ELEMENTARY
PARTICLES
AND ATOMIC
NUCLEI

PARTICLES & NUCLEI

SCIENTIFIC REVIEW JOURNAL

Founded in December 1970

VOL.27

PART 2

Six issues per year

DUBNA 1996

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА

ЭЧАЯ

НАУЧНЫЙ ОБЗОРНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в декабре 1970 года

ТОМ 27

ВЫПУСК 2

Выходит 6 раз в год

ДУБНА 1996

Главный редактор

А.М.БАЛДИН

Редакционная коллегия:

В.Л.АКСЕНОВ

(зам. главного редактора),

П.Н.БОГОЛЮБОВ,

С.К.БРЕШИН,

В.В.БУРОВ,

В.В.ВОЛКОВ,

Ц.Д.ВЫЛОВ,

Ю.П.ГАНГРСКИЙ,

В.П.ДЖЕЛЕПОВ,

П.И.ЗАРУБИН,

И.С.ЗЛАТЕВ,

П.С.ИСАЕВ

(ответственный секретарь),

В.Г.КАДЫШЕВСКИЙ

(зам. главного редактора),

К.КАУН,

Д.КИШ,

Н.Я.КРОО,

Р.М.ЛЕБЕДЕВ,

И.Н.МИХАЙЛОВ,

НГУЕН ВАН ХЪЕУ

(зам. главного редактора),

Ю.Ц.ОГАНЕСЯН,

Ю.П.ПОПОВ,

А.Н.СИСАКЯН,

В.Г.СОЛОВЬЕВ

(зам. главного редактора),

А.Н.ТАВХЕЛИДЗЕ,

А.А.ТЯПКИН,

А.И.ХРЫНКЕВИЧ,

Ч.К.ШИМАНЕ

Редакторы **Е.К.Аксенова**, тел. 65-165

Э.В.Ивашевич

STUDIES OF COLLECTIVE CURRENTS IN NUCLEI

I.N.Mikhailov

Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, Dubna

Ch.Briançon

CSNSM (IN2P3-CNRS), Orsay, France

P.Quentin

CENBG (IN2P3-CNRS and Université Bordeaux-1), Gradignan, France

A search for fingerprints of «vortical currents» in nuclear structure data is presented. These currents affect little or not at all the changes of nuclear shape and volume. The paper starts with a classification of currents and with their parametrization applicable for studies of spherical and deformed nuclei. Here we generalize the concept of the time-dependent TAS transformation of liquid elements positions introduced by Riemann's followers in their studies of currents in ellipsoidally shaped liquid bodies. We examine fingerprints of a dipole toroidal motion in the electromagnetic properties of rotational states built upon the collective octupole excitations in deformed nuclei and show one example where the experimental data give an indication of an important role played by such a mode. We study the conjecture according to which the vortical mode involved in the motion with a uniform circulation of nuclear matter may be regarded as an independent collective branch of excitation. This study allows us to interpret $\Delta I = 4$ staggering of the energies of superdeformed states. We discuss also another mechanism of producing regular perturbations in the spectrum of rotational bands: the installation of an uniaxial octupole deformation with rapid rotation. We mention an analogy between our interpretation of unusual properties of superdeformed nuclear states and recent findings concerning the quantal apparatus produced using the modern technology (SQUID's). This analogy shows that the effects we are talking about may take place not only in atomic nuclei but also in other «mesoscopic» systems.

Описан поиск следов вихревого движения ядерной материи в данных о структуре ядра. Такое движение не влияет совсем или влияет слабо на изменения ядерной формы и объема. В обзоре дается классификация токов и их параметризация, удобная для изучения сферических и деформированных ядер. Делается обобщение концепции зависящего от времени «TAS»-преобразования координат элементов жидкости, предложенное последователями Римана в своих исследованиях потоков в жидких телах эллиптической формы. Изучаются следы дипольного тороидального движения в данных об электромагнитных свойствах состояний ротационных полос, выстроенных над

коллективными октупольными возбуждениями, и приводится пример, указывающий на важную роль такого движения. Анализируется предположение, согласно которому вихревая мода движения с постоянной по объему циркуляцией скорости может рассматриваться как независимая ветвь возбуждений. Это исследование позволяет интерпретировать $\Delta I = 4$ искажения спектра супердеформированных (с.д.) полос. Обсуждается альтернативный механизм генерации периодических искажений спектра ротационных полос: возникновение неаксиальной октупольной деформации, вызванное быстрым вращением. Отмечается аналогия между нашей интерпретацией необычных свойств с.д. состояний атомных ядер и недавними открытиями, сделанными с помощью квантовых приборов, изготовленных на базе современной технологии (SQUID-ов). Аналогия говорит о том, что обсуждаемые нами эффекты могут иметь место не только в атомных ядрах, но и в других мезоскопических системах.

1. INTRODUCTION

It is well known by now that atomic nuclei reveal elastic properties when responding to perturbations creating collective flow of the matter inside them. The best studied branches of nuclear collective modes of motion are the ones generated by changes of the nuclear shape (and size). However, the scope of collective modes in nuclei is much larger than that which can be related with the changes of the nuclear geometry. We may mention here the giant magnetic resonance as one particular example of collective motion which is not directly related to the nuclear shape. An analysis of nuclear currents plays the leading role in the description of such a motion. In fact, such an analysis contributes much to the understanding of all kinds of nuclear collective motions. The currents reflect changes in the distribution of nucleons in the momentum space, and consequently they are related with the changes in the nuclear Fermi-surface determining the properties of quantal Fermi liquids.

It is the study of the properties of nuclear collective currents that unifies investigations reported here. The paper is organized as follows:

- In **Section 2** we give a classification of the types of collective currents in spherical and deformed nuclei. A practical method is suggested for the description of the motion in deformed nuclei introducing a «stretched» velocity field corresponding to a given type of motion in a spherical nucleus. Special attention is paid to the vortical motion. An important example is discussed concerning the vortical motion involved in the rotating Riemann S -ellipsoids.
- **Section 3** treats the quantization of the vortical motion in that case. The band structure issued from the coupling of the global rotation with the Kelvin circulation is examined and compared with the experimental energy spectra obtained for the yrast superdeformed states which show a characteristic staggering behaviour.

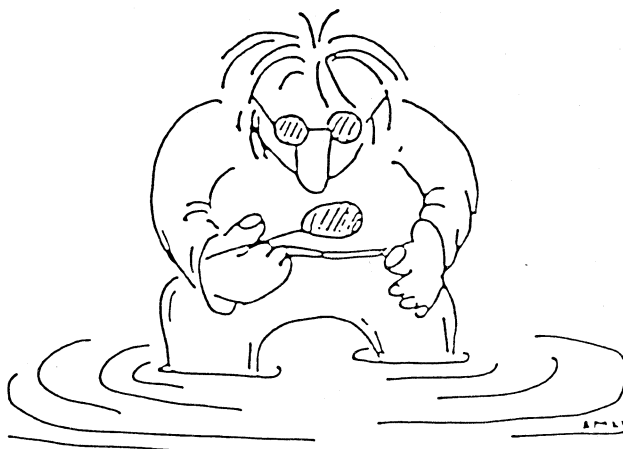


Fig.1. By examining the *flows* of the collective tide perhaps we might be able to learn something about its *ebbs* (elementary building blocks) [1]

- In **Section 4** we generalize the procedure described in the previous section to the case of nuclei having no axial symmetry. This allows us to show the relation of our description of the staggering in superdeformed bands with the description given in other publications.
- In **Section 5** we show that the most probable type of nonaxiality in superdeformed nuclei may be within the C_3 -symmetry.
- **Section 6** is devoted to a more complicated type of vortical motion generating the dipole toroidal moment. The fingerprints of such a motion are presented.
- In **Section 7** we remark the parallels between the quantal descriptions of vortical motion in a liquid drop and of the motion of charged particles in an electromagnetic field (Aharonov-Bohm effects).

2. INTRINSIC VORTICITY AND OTHER NONTRIVIAL MODES OF NUCLEAR MOTION

In Refs. [2], [3] and [4] a scheme has been worked out to develop a velocity field parametrization for the study of the currents in deformed nuclei. This problem is of the same nature as the classical hydrodynamical problem of determining the flows of the matter in a homogeneous liquid filling a container whose shape and orientation in the space is changing with time [5]. This

approach is currently applied in Ref.[6] to visualize the collective flow in some nontrivial cases.

The method suggested here is based on the knowledge of currents describing the motion in spherical nuclei. The parametrization of velocity fields for the latter can be easily done applying the techniques of spherical vector functions [7] $\mathbf{Y}_{L,M}^L(\mathbf{r}/r)$ by writing for the velocity field an expression

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_{L, M} f_{L,M}(t) \mathbf{Y}_{L,M}^L(\mathbf{r}/r).$$

Expansion for currents in spherical vectors has much in common with the widely used in nuclear physics expansion for the distance of a point on the surface from the origin of the coordinate frame

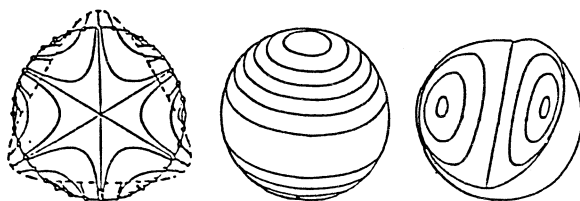
$$R(\mathbf{r}/r) = R_0 \sum_{l,m} \alpha_{l,m} Y_{l,m}(\mathbf{r}/r).$$

However, the former expansion provides possibilities of studying collective phenomena which are not related with the nuclear shape. Figure 2 allows one to see this feature in a clear way. Here some examples of velocity fields obtained using the spherical vectors expansion are presented. In the figure the lines of «solenoidal» (leaving unchanged the density) currents in spherical nuclei are shown.

Oscillations of the surface around the spherical shape of multipolarity 2, 3 and 4 can be described in terms of the shape parameters $\alpha_{l,m}$ with $l=2, 3$ and 4 or in terms of the velocity fields $\mathbf{u}_{l,m}(\mathbf{r}) = f_{l,m} r^{l-1} \mathbf{Y}_{l,m}^{l-1}(\mathbf{r}/r)$. The pattern of velocity fields corresponding to the surface oscillations is shown in Fig.2 in the fragments marked as $L=2b$ (for quadrupole vibrations), $L=3$ (octupole case) and $L=4$ (hexadecapole case).

All the other fragments of Fig.2 describe the motion in the spherical body leaving undisturbed the surface. Among the modes of the motion shown in the picture there are two (isoscalar) $l=1$ modes: the dipole toroidal mode ($L=1a$) and the mode describing the distributed magnetism ($L=1b$). In addition to these modes, Figure 2 shows the quadrupole magnetic mode ($L=2a$) and the quadrupole toroidal mode ($L=2c$).

The spherical vectors form a set of functions orthonormal on the sphere and may be used as a basis for numerical solution for dynamic equations of the motion in the normal and in the quantum fluids. However, to apply them, one must specify first of all the model of a quantum-fluid dynamics. These functions may be used differently as generic fields giving the possible motions in bodies (either classical or quantal) of an arbitrary shape. To do it, we suggest to generate velocity fields considering the displacements of liquid elements which appear after a series of transformations shown in Fig.3 and defined as:

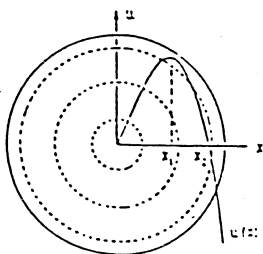


$$L = 3$$

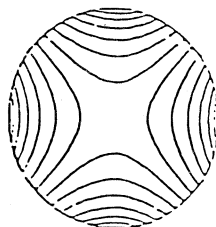
$$L = 2a$$

$$L = 1a$$

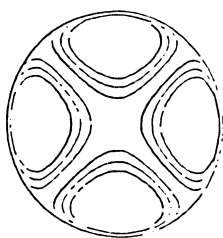
$$f(r, t) = a(t) + b(t)r^2$$



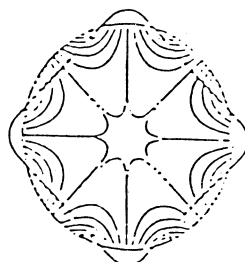
$$L = 1b$$



$$L = 2b$$



$$L = 2c$$



$$L = 4$$

$$f(r, t) = a'(t)r + b'(t)r^3$$

Fig.2. Examples of «elementary» currents visualized by «the lines of currents». In these examples the function $f(r)$ in the expansions of the current in spherical vectors is given by polynoms in r whose power is < 4

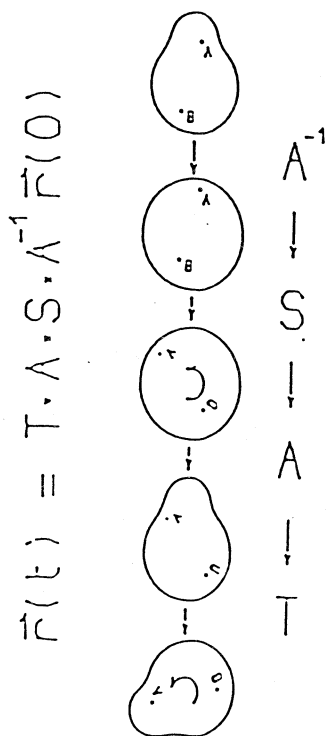


Fig.3. The transformations generating currents in deformed nuclei keeping their shapes

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{T} \mathbf{A} \mathbf{S} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}(0). \quad (1)$$

Here $\mathbf{A} \mathbf{r}$ is the displacement of a given liquid element resulting from the transformation of the body's shape by the irrotational flow, $\mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}$ describes the inverse displacement, $\mathbf{T}$ is a rotational matrix and finally $\mathbf{S} \mathbf{r}$ is a displacement resulting from one of the «elementary» modes of motion in a spherical nucleus.

The velocity field corresponding to this series of transformations is given by the following expression:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} + \mathbf{u}_A(\mathbf{T}^{-1} \mathbf{r}) + \mathbf{u}_S^{\text{str}}(\mathbf{T}^{-1} \mathbf{r}^{\text{str}}). \quad (2)$$

The first term in eq.(2) describes the uniform rotation of the body ($\boldsymbol{\Omega}_i = \sum_{j,k} \epsilon_{i,j,k} (\dot{\mathbf{T}} \mathbf{T}^{-1})_{j,k}$), while

the second and the third ones are associated with the intrinsic motion. The second term corresponds to the irrotational flow transforming the body into a sphere ($\mathbf{u}_A = \dot{\mathbf{A}} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}$). The last one gives the contribution from the chosen mode of «elementary vortical» flow «S» in the spherical nucleus ($\mathbf{u}_S = \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{r}$) «stretched» by the deformation so that

$$\mathbf{u}_S^{\text{str}} = \mathbf{A} \mathbf{u}_S, \quad \mathbf{r}^{\text{str}} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{r}. \quad (3)$$

In the general case, the operator $\mathbf{A}$ must result from a variational calculation and thus demands numerical calculations. When the shape of the body is ellipsoidal, the operator $\mathbf{A}$ is a diagonal matrix whose matrix elements in the inertial frame are half the length (semiaxes) in the principal directions (a_x , a_y and a_z). When the «S» transformation is also a uniform rotation (around the z-axis of the ellipsoid), the corresponding collective velocity field $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ in the laboratory frame has the following components on the principal axes of the nucleus:

$$u_x = -(\Omega + q \omega)y, \quad u_y = \left(\Omega + \frac{\omega}{q} \right) x, \quad u_z = 0 \quad \left(q = \frac{a_x}{a_y} \right)$$

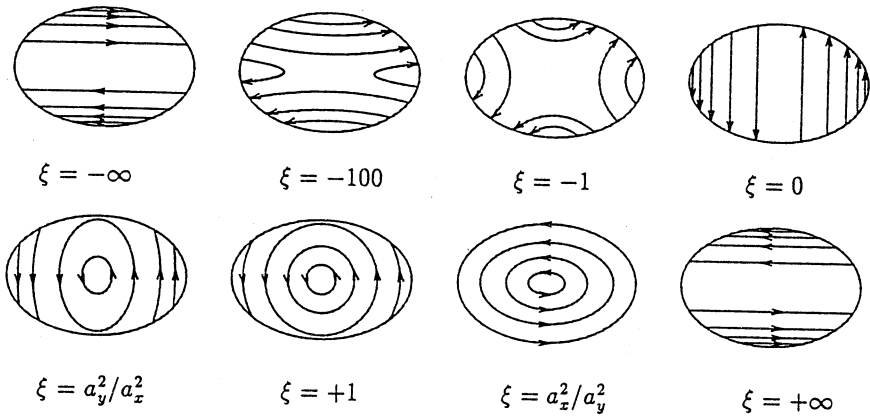


Fig.4. Flow patterns of Riemann's S -ellipsoids corresponding to various values of the dimensionless parameter ξ (see text). The picture shows the case when the global rotation frequency Ω and $\text{rot}(\mathbf{u})$ are parallel to one of the main axes of the inertia tensor (z -axis)

introducing the frequencies (ω and Ω) of « S » and « T » rotations. The velocity field has a uniform circulation:

$$(\text{rot } \mathbf{u})_z = 2\Omega \left(1 + \frac{\omega}{2\Omega} \left(q + \frac{1}{q} \right) \right).$$

This field is a particular solution of the well-known classical Dirichlet problem for the most general linear velocity field in the system bounded by an ellipsoidal surface as studied by Riemann [5], [8]. The pattern of the motion depends on the quantity

$$\xi = \frac{1 + q^{-1} \frac{\omega}{\Omega}}{1 + q \frac{\omega}{\Omega}}.$$

The corresponding parametrization of the velocity field comprises the uniform (rigid-body) rotation ($\xi = 1$), the motion of an ideal liquid without circulation within a nonspherical stationary rotating container ($\xi = -1$), various shear modes ($\xi = 0, \pm \infty$) and also the flow with an arbitrarily large angular momentum inside the container with an elliptic shape which does not change its orientation in the space ($\xi = a_x^2/a_y^2$). Figure 4 shows a variety of physically different types of flow which could be studied in this way (assuming $a_x < a_y \leq a_x$).

In Refs. [2], [3], [4] we have generalized the usual Routhian or cranking approach for uniform rotations to allow the study of a variety of collective

modes. It is done using a formal analogy between canonical transformations in Classical Mechanics and specific unitary transformations in Quantum Mechanics. The stationary motion in the presence of currents is described by a «cranked» Hamiltonian with the generalized cranking term [3]

$$\hat{H}_{\text{cranked}} = \hat{H} - \frac{1}{2\hbar} \sum_i (\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \mathbf{u}), \quad (4)$$

where $\mathbf{u}$ is the velocity field and the summation goes over all the particle's indices. In classical mechanics the cranking term represents the point-coordinates transformation to the coordinates attached to moving «liquid elements», whereas in quantum formulation it corresponds to the unitary transformation of the wave function

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \exp(i\hat{S}) \Psi \quad (5)$$

with the $\hat{S}$ -operator such that

$$\frac{d\hat{S}}{dt} \hat{S}^{-1} = \frac{1}{2\hbar} \sum_i (\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \mathbf{u}). \quad (6)$$

The presence of the cranking term in the Hamiltonian and the associated phase transformation of the wave function lead to changes in the distribution of nucleons in the momentum space and have numerous physical consequences [9].

Such an approach is applied to the coupling of a global rotation with a uniform intrinsic vortical motion in the aligned case discussed in the previous lines. Applying it, the nuclear inertia properties with respect to the motion were estimated in the simple case when the energy dependence on $\Omega = \Theta$ and $\omega = \theta$ was approximated by a quadratic form

$$E(\Omega, \omega) = \frac{A}{2} \Omega^2 + B \Omega \omega + \frac{C}{2} \omega^2. \quad (7)$$

This was done using a truncated $\hbar$ expansion of the generalized cranking equation when the effective nucleon-nucleon interaction is a full-fledged Skyrme force [9]. The density was approximated as being constant within an ellipsoid whose semiaxes were given by

$$a_x = a_0 q^{2/3}, \quad a_y = a_z = a_0 q^{-1/3},$$

where a_0 is expressed in terms of the total particle number N and the usual size parameter r_0 by $a_0 = r_0 N^{1/3}$, whereas $q = a_x/a_y$ is the shape parameter. Introducing the parameter

$$\gamma = \frac{2}{5} m r_0^2 N^{5/3} q^{1/3},$$

which is equal to the rigid body moment of inertia times $q^{1/3}$, and defining the geometrical factor

$$R = \frac{1}{2} \left(q + \frac{1}{q} \right),$$

one obtains for the three inertia parameters in eq.(4) the following estimates:

$$A = \gamma R \left[1 - \left(\frac{D}{\gamma} \right) R \right] \quad B = \gamma \left[1 - \left(\frac{D}{\gamma} \right) R \right] \quad C = \gamma R \left[1 - \left(\frac{D}{\gamma R} \right) \right]. \quad (8)$$

The semiclassical factor D/γ is given in terms of the real and effective masses in nuclear matter $(m^*/m)_{NM}$ by

$$\frac{D}{\gamma} = 10(9\pi)^{-2/3} (m^*/m)_{NM}^{-1} N^{-2/3} q^{-1/3}$$

and is small compared to one.

In this way one finds that the semiclassical approximation of the corresponding stationary solutions of the Hartree-Fock equations gives the classical Riemann results [8] at the Thomas-Fermi level with small corrections ($\sim N^{-2/3}$) at the order $\hbar^2$. The physical significance of the inertia parameters A , B and C will be studied in the next section.

3. QUANTAL ANALOGUE OF THE MOTION INVOLVED IN THE ROTATING RIEMANN *S*-ELLIPSOIDS AND STAGGERING IN SOME SUPERDEFORMED ROTATIONAL BANDS

The use of the quantal analogue of the motion involved in the rotating Riemann *S*-ellipsoids in nuclear physics had been already proposed by many authors, including D.R.Rowe [1], R.Y.Cusson [13], G.Rosensteel [10]—[12], P.Kramer [14] and one of the authors [15]. A simple quantization procedure of such a motion is suggested in the papers [2]–[4] and considered in more detail in Ref.[9]. To quantize the motion, one introduces the angular momentum $\hbar I$ and the «vortex» momentum $\hbar J$ as conjugate momenta (in classical mechanics terms) with respect to the angle variables $(\Theta$ and $\theta)$ of «*T*» and «*S*» rotations:

$$\hbar I = \frac{\partial E}{\partial \Omega}, \quad \hbar J = \frac{\partial E}{\partial \omega}. \quad (9)$$

Then, the quantal Hamiltonian operator is introduced rewriting the energy in terms of I and J and substituting them by

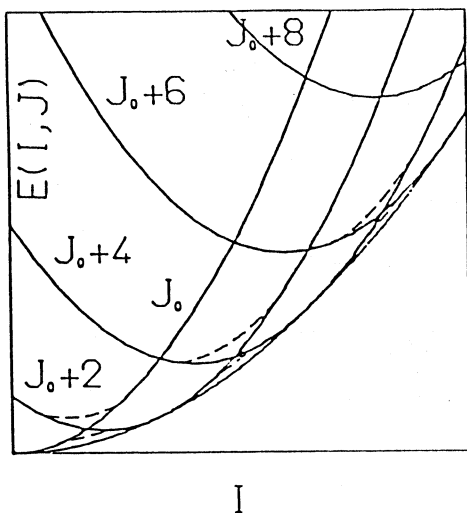


Fig.5. Schematic representation of the band pattern $E(I, J)$ in its dependence on the angular momentum (I) and «vorticity» (J) quantum numbers

$$\hat{I} = -i \frac{\partial}{\partial \Theta}, \quad \hat{J} = -i \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (10)$$

The quantal states are determined from the Schrodinger equation for the wave function $\Psi_{I,J}(\Theta, \theta) = \pi^{-1/2} \exp(i(I\Theta + J\theta))$ imposing natural periodicity boundary conditions at the ends of the interval $0 \leq \Theta, \theta \leq \pi$. The precise formulation of the boundary conditions involves the intrinsic part of the wave function. Whatever its contribution, the periodicity conditions admit only a discrete set of quantum numbers I and J : $I = I_0 + 2k$, $J = J_0 + 2l$ with integer numbers k and l .

In the quadratic case one arrives at the following expression for the energy:

$$E(I, J) = \pi^2 \lambda \left(\frac{A}{2} I^2 - B I J + \frac{C}{2} J^2 \right) \quad (11)$$

with

$$\lambda = (AC - B^2)^{-1}$$

(A, B, C being the inertia parameters defined in eq.(7)).

The corresponding quantal states form a set of rotational collective bands as illustrated in Fig.5. The collective band states belong to parabolas labelled by the vorticity number J . The parabola enveloping these parabolas is the classical yrast band with a moment of inertia equal to C . The yrast sequence is composed of states belonging to different collective bands. The passage from one band to another introduces a kink in the energy as a function of the angular momentum. The periodicity in I of such kinks corresponds to $\Delta I = 2B/C$. The maximal value of the kink (which does not change along the yrast line in the quadratic case) is equal to $\Delta E_y = C/2(AC - B^2)$.

Recently, an energy staggering yielding a $\Delta I = 4$ periodic structure has been found experimentally for some rotational bands in superdeformed nuclear states. This structure whose amplitude corresponds merely to less than 0.1 per cent of the observed transition energies has been found in the presently available data

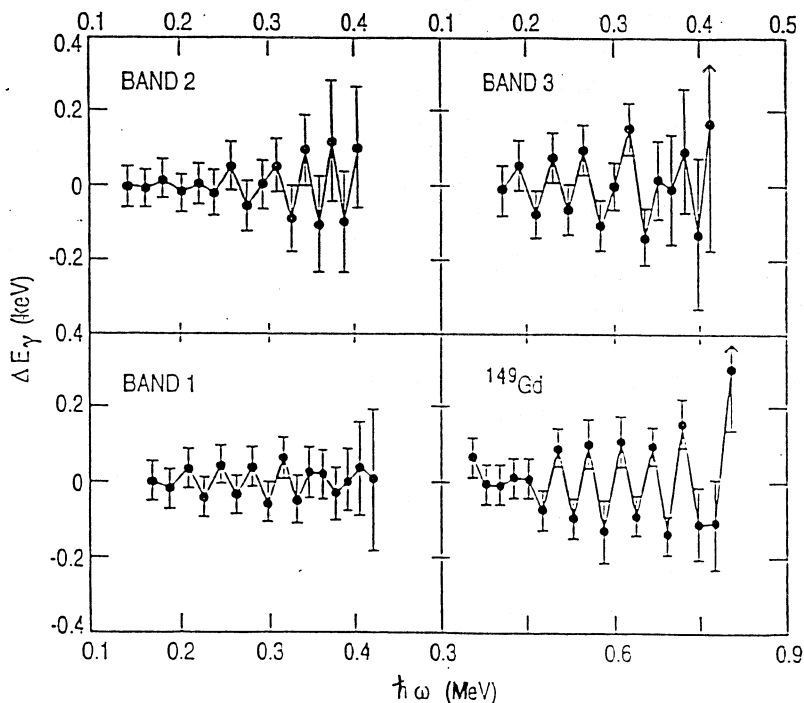


Fig.6. Experimental [17] staggering amplitude in ^{149}Gd (right lower corner) and in three superdeformed bands of ^{194}Hg (bands 1, 2, 3)

$$\Delta E_{\gamma} = \frac{3}{8} \left(E_{\gamma}(I) - \frac{1}{6} (4E_{\gamma}(I+2) + 4E_{\gamma}(I-2) - E_{\gamma}(I+4) - E_{\gamma}(I-4)) \right).$$

only in ^{149}Gd for one and in ^{194}Hg for three bands [17] (see Fig.6). However a few other candidates are tentatively proposed in nuclei of the same super-deformation region or in the $A \simeq 130$ region [18].

Clearly, the coupling of the global rotation with the uniform vortical motion above considered may provide an explanation for such a staggering phenomenon. Indeed, within the described model when $C/B=2$ the interval between the kinks is $\Delta I=4$. In this case the kinks are absolutely regular. When C/B is close to two, the staggering becomes slightly modulated and may even change sign when increasing the angular momentum. All such features seem to appear in the experimental results as shown in Fig.6.

One finds also that the semiclassical estimates of the model parameters, if not exactly coincide with the values deduced from experimental data, are globally consistent with them [4].

No contradiction to the explanation of staggering in terms of coupling of two different «rotation-like» modes could be inferred from the decay-time measurements of the states in staggered bands. In fact, the time of life measurements show within our model assumptions that the J -mixing does exist: otherwise the $E2$ -transitions along the yrast line would not be quenched but would exhibit a staggering which is not seen experimentally. It has been proved [9] that the level of quenching of $E2$ transitions resulting from our modelization of the yrast line is not inconsistent with the data, considering their currently available poor accuracy.

On the other hand, J -mixing leads to some quenching of the kink magnitude. The semiclassical theory prediction of the staggering amplitude which is done ignoring the mixing yields a value several times greater than experimentally found [9]. This difference may be attributed at least partly to the J -mixing of collective bands.

4. VORTICITY QUANTUM NUMBER CONSERVATION VERSUS AXIAL SYMMETRY VIOLATION

The $\Delta I=4$ character of the staggering phenomenon has prompted some explanations involving a non-axial hexadecapole deformation, namely the $L, M=4,4$ collective degree of freedom [16], [19], [20]. Does the suggested C_4 -symmetry exclude the conservation of the vorticity quantum number? In other words, do the two lines of interpretation of the staggering phenomenon exclude each other? Apparently, it is not so. The rotational motion in high-spin superdeformed states must follow the rules of the quasiclassical theory. According to the presented model, in nuclei where the staggering phenomenon is found, the value of the quantum number in the states lying near the yrast line must be equal to $J \simeq (B/C)I \simeq I/2 \gg 1$. Then to answer the question one may study the vortical motion in these nuclei using also semiclassical arguments.

The way of generating vortical currents suggested in **Section 2** is quite general and may be applied to the bodies of arbitrary shapes and to arbitrary currents going in three dimensions. Applying the technique similar to that which was used before (see, in particular, **Section 3**) one arrives at the Hamiltonian

$$\hat{H} = \hbar^2 \sum_{i=1}^3 \lambda_i \left(\frac{A_i}{2} \hat{I}_i^2 - B_i \hat{I}_i \hat{J}_i + \frac{C_i}{2} \hat{J}_i^2 \right). \quad (12)$$

Assuming that in the states lying near the yrast line, the global and the stretched rotations go predominantly around one of the principal axes of inertia tensors A_{ij} , B_{ij} , C_{ij} , which we call as axis one, we rewrite the Hamiltonian in the following way:

$$\hat{H} = \hbar^2 \lambda_1 \left(\frac{A_1}{2} \mathbf{I}^2 - B_1 \mathbf{I} \mathbf{J} + \frac{C_1}{2} \mathbf{J}_1^2 \right) + \hbar^2 \hat{h}' \quad (13)$$

The second term in the r.h.s. of eq. (9) has the form:

$$\hat{h}' = \hat{h}'_A + \hat{h}'_B + \hat{h}'_C, \quad (14)$$

where

$$\begin{aligned} \hat{h}'_A &= \alpha_A (I_2^2 + I_3^2) + \beta_A (I_2^2 - I_3^2) \\ \hat{h}'_B &= -2\alpha_B (I_2 J_2 + I_3 J_3) + \beta_B (I_2 J_2 - I_3 J_3) \\ \hat{h}'_C &= \alpha_C (J_2^2 + J_3^2) + \beta_C (J_2^2 - J_3^2) \end{aligned} \quad (15)$$

and

$$\begin{aligned} \alpha_A &= \frac{1}{4} (\lambda_2 A_2 + \lambda_3 A_3 - 2\lambda_1 A_1), & \beta_A &= \frac{1}{4} (\lambda_2 A_2 - \lambda_3 A_3) \\ \alpha_B &= \frac{1}{4} (\lambda_2 B_2 + \lambda_3 B_3 - 2\lambda_1 B_1), & \beta_B &= \frac{1}{4} (\lambda_2 B_2 - \lambda_3 B_3) \\ \alpha_C &= \frac{1}{4} (\lambda_2 C_2 + \lambda_3 C_3 - 2\lambda_1 C_1), & \beta_C &= \frac{1}{4} (\lambda_2 C_2 - \lambda_3 C_3). \end{aligned} \quad (16)$$

When the two generalized momenta $\mathbf{I}$ and $\mathbf{J}$ are parallel and have the largest projection on the first axis in the intrinsic reference frame the following boson representation of $\mathbf{I}$ and $\mathbf{J}$ is appropriate (see Ref.[21] for the case of merely one set of angular momentum operators):

$$\begin{aligned} I_{\pm} &= I_2 \pm iI_3 \\ I_1 &= I - c_I^\dagger c_I, & I_+ &= \sqrt{2I} c_I^\dagger, & I_- &= \sqrt{2I} c_I \\ J_1 &= I - c_J^\dagger c_J, & J_+ &= \sqrt{2J} c_J^\dagger, & J_- &= \sqrt{2J} c_J. \\ [c_i, c_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Using the boson operators one writes the first term on the r.h.s. of eq.(13) as

$$\begin{aligned} &\hbar^2 \lambda_1 \left(\frac{A_1}{2} \mathbf{I}^2 - B_1 \mathbf{I} \mathbf{J} + \frac{C_1}{2} \mathbf{J}_1^2 \right) = \\ &= E(I, J) + \hbar^2 \lambda_1 B_1 (I c_J^\dagger c_J + J c_I^\dagger c_I - \sqrt{IJ} (c_I^\dagger c_J^\dagger + c_J c_I)), \end{aligned} \quad (17)$$

where

$$E(I, J) = \hbar^2 \lambda_1 \left(\frac{A_1}{2} I(I+1) - B_1 IJ + \frac{C_1}{2} J(J+1) \right). \quad (18)$$

In this way one arrives at the following expression for the Hamiltonian :

$$\hat{H} = E(I, J) + \hbar^2 \hat{h}_{I,J}, \quad (19)$$

where $\hat{h}_{I,J}$ is a quadratic Hermitian polynomial:

$$\hbar^2 \hat{h}_{I,J} = \sum_{k,l} (\epsilon_{k,l}(I, J) c_k^\dagger c_l + \Delta_{k,l}(I, J) (c_k^\dagger c_l^\dagger + c_k c_l)), \quad (20)$$

(the indexes k and l standing for I or J).

The boson operators

$$\hat{b}_k^\dagger = \sum_l (x_{k,l}(I, J) c_l^\dagger + y_{k,l}(I, J) c_l) \quad (21)$$

satisfying the commutation relation

$$[\hat{h}_{I,J}, b_k^\dagger] = \omega_k(I, J) b_k^\dagger \quad (22)$$

are the creation operators of the excited collective states; they determine also the yrast state wave function $\Psi_{\text{yrast}}(I, J)$ which is the vacuum with respect to the $\hat{b}$ operators. The contribution of the $\hat{h}_{I,J}$ operator to the yrast state energy $\Delta E(I, J)$ can be found when bringing this operator to the form

$$\hat{h}_{I,J} = \Delta E(I, J) + \hbar^2 \sum_{k=1}^2 \omega_k(I, J) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \quad (23)$$

The eigenfunctions of this Hamiltonian are given by the multiphonon configurations

$$\Psi_{n_I, n_J} = \frac{1}{\sqrt{n_I! n_J!}} (b_I^\dagger)^{n_I} (b_J^\dagger)^{n_J} \Psi_{\text{yrast}}(I, J)$$

with the vacuum function $\Psi_{\text{yrast}}(I, J)$ such as $b_k \Psi_{\text{yrast}}(I, J) = 0$. The zero-point precession renormalizes the energy by

$$\Delta E(I, J) = \hbar^2 \langle \Psi_{\text{yrast}}(I, J) | \hat{h}_{I,J} | \Psi_{\text{yrast}}(I, J) \rangle$$

and may affect the staggering amplitude.

This renormalization has no evident relation with the one issuing from the effective Hamiltonians considered in Refs. [16], [19], [20] where the installation of the C_4 symmetry is advocated. In the quoted papers vortical currents are not considered. On the other hand, the Hamiltonians suggested in these papers

contain, in addition to terms quadratic in the angular momentum operators I_i , also terms of the fourth power chosen so that the effective Hamiltonians possess the C_4 -symmetry. In the language of this section such terms correspond to anharmonic corrections with respect to the precessional global rotation. The authors show that appropriate combinations of parameters in such Hamiltonians lead to the staggering pattern of the spectrum.

Admitting both the vortical motion and the anharmonic terms, one increases the number of parameters in such effective Hamiltonians and consequently increases the number of favorable combinations yielding staggering. Thus, the installation of a C_4 -symmetry may, in principle, interfere (in constructive or destructive ways) with the quantized vortical motion in producing (or not) a persisting staggering in rotational superdeformed bands. One must have in mind, however, that whatever the chosen line of explanation for the staggering phenomenon is one must tune the parameters of the effective Hamiltonians in a very specific way: apparently the staggering appears as a result of an interplay of many tiny details of the nuclear structure and this happens only in very rare cases. There is no reason to think that various physically different ways of generating the staggering could be realised in the same nucleus.

We point out that the interplay of global rotation and of vortical motion may simulate the unharmonic effects in each of these modes even then no anharmonic terms are present in the Hamiltonian. Upon writing the one-phonon wave function ψ as

$$\psi = b^\dagger \Psi_{\text{yrast}} = \begin{pmatrix} \varphi_I \\ \varphi_J \end{pmatrix}$$

with

$$\varphi_k = (x_k b_k^\dagger + y_k b_k) \Psi_{\text{yrast}}$$

one obtains for the function φ_I an equation

$$\left(\hat{h}_{I,I} - \hat{h}_{I,J} \frac{1}{\hat{h}_{J,J} - \omega} \hat{h}_{J,I} - \omega \right) \varphi_I = 0.$$

The power expansion of the operator $\hat{h}_{I,J} \frac{1}{\hat{h}_{J,J} - \omega} \hat{h}_{J,I}$ yields an effective

Hamiltonian with essentially the same general structure as that which could be obtained for the precessional motion starting from the effective Hamiltonians of the C_4 -models. This shows merely that the effective Hamiltonians of this type may describe various physical phenomena not necessarily related with the symmetry of the nuclear mean field.

5. WHY NOT CONSIDER THE C_3 -SYMMETRY INSTEAD OF C_4 ?

The model of two coupled collective modes is able, as we have seen, to explain the staggering in the yrast band with an arbitrary periodicity ΔI in the angular momentum scale depending on the ratio of inertia parameters. The C_4 symmetry model has an appealing feature of being seemingly related with the $\Delta I = 4$ nature of the staggering found experimentally. Here we show that this relation is not intimate at all, and that the type of the axial symmetry breaking is not directly related with the interval between the kinks.

The well-known differences between the even I and odd I states in deformed nuclei are indeed deeply related with the prevailing D_2 -symmetry of the nuclear mean field (and thus with the C_2 -symmetry contained in D_2 -symmetry [22]). This difference is due to the nature of the angular variables determining the spacial orientation of the nucleus: these angles are associated with the orientation of the main axes of the nuclear inertia tensor. Indeed, the choice of the intrinsic reference frame associated with the inertia tensor is not unique. Correspondingly, the definition of intrinsic variables is not unique in this case: each of equivalent orientations of the principal axes of a quadrupoloid with respect to the reference frame corresponds to a particular set of intrinsic coordinates. These properties of systems with D_2 -symmetry are incorporated in the unified nuclear model [21] and are expressed by the condition imposed on the wave function with respect to the coordinates transformation associated with a reference frame rotation by the angle π around each of the principal axes of the quadrupole tensor: the transformation of collective and intrinsic coordinates issuing from such an operation must leave the wave function unchanged. Such formulation of the theory lies in the origin of the differences in the description of states with positive and negative signatures and is deeply related with various « $\Delta I = 2$ staggering» phenomena.

One may imagine a physical system for which such a definition of collective angles is inappropriate: a system with the shape of a perfect cube. The inertia tensor of such systems possesses the spherical symmetry, and the choice, usual for nuclear physics, of angular coordinates is not adequate for them. Then one would be inclined to associate the collective angles with the hexadecapole moment instead of the quadrupole moment. The quantal collective motion in such systems must be quite different from that which is known in nuclear physics. Here one would expect various kinds of « $\Delta I = 4$ staggering».

Surely, the superdeformed nuclear states are not states to be understood with such a choice of the reference frame. Here we deal with a system having a large quadrupole moment. The image given for nuclei by the adepts of the C_4 -symmetry reminds a cigar kept in a tightly packed rectangular box: looked

from the thin side, it appears as an object of rectangular shape. The usual definition of collective angles must be perfectly justified in this case. Thus, no a priori limiting conditions additional to those existing in the unified model could be formulated and no a priori $\Delta I = 4$ staggering could be expected as a consequence of the $Y_{4,4}$ deformation. In corroboration with this statement, the effective Hamiltonians introduced in Ref.[19], [20] describe various kinds of spectra with or without staggering depending on the values of entering them parameters.

These arguments do not mean that the explanation of the staggering in terms of effective Hamiltonians in the above quoted papers is necessarily wrong. They indicate that the staggering phenomenon does not give a solid proof for the existence of a C_4 -symmetry: these Hamiltonians may describe implicitly any kind of physics, and in particular the quantized vortical motion advocated in this paper.

The staggering effects and other irregularities of the rotational bands may be related, in principle, with other types of violation of the axial symmetry. In particular, the $Y_{3,3}$ -deformation of the mean field has good reasons to be involved in the high-spin physics. This is because the octupole collective excitations carry an intrinsic angular momentum ($j_{\text{intr}} = 3\hbar$ for purely octupole one-phonon state) which has a natural tendency to align with the collective rotational angular momentum.

The alignment is reflected by a reduction of the energy interval between the yrast and the lowest $K^\pi = 0^-$ bands upon increasing the total angular momentum. It is found practically in all even-even deformed nuclei already at very moderate angular momenta. Figure 7 shows two examples of such a tendency [23]: one for a nucleus considered as being rigid with respect to octupole vibrations (^{232}Th) and the other for an octupolly soft nucleus (^{220}Ra). The Coriolis effects leading to the alignment may be studied within the model Hamiltonian [23]

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{rot}}(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{j}}) + \hat{H}_{\text{intr}}, \quad (24)$$

where $\hat{H}_{\text{rot}}$ represents a rotational part depending on the difference between the total angular momentum operator ($\hat{\mathbf{I}}$) and the angular momentum operator ($\hat{\mathbf{j}}$) associated with the octupole vibrations of the nuclear surface.

The second term in the above formula describes the excitation of vibrational degrees of freedom :

$$\hat{H}_{\text{intr}} = \sum_{K=-3}^3 \omega_{|K|} b_K^\dagger b_K + \hbar \left(\sum_{K=-3}^3 b_K^\dagger b_K \right)^2 \quad (25)$$

containing thus an anharmonic correction in addition to the harmonic term.

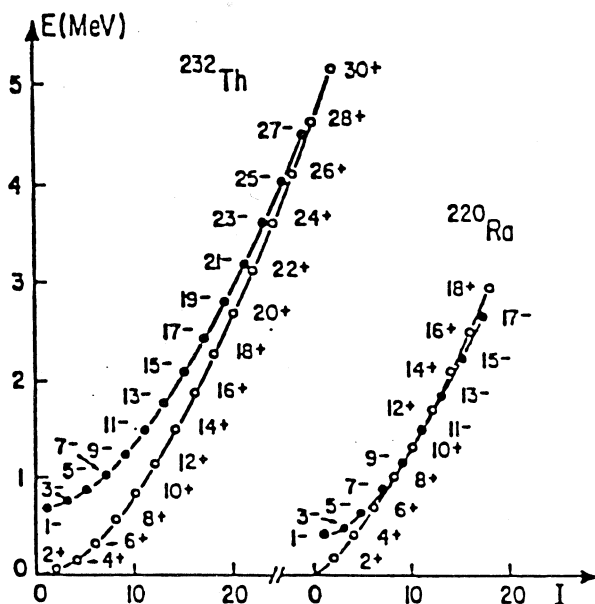


Fig. 7. Energy of nuclear states as function of the spin for ^{232}Th [24] and ^{220}Ra [25] nuclei

The intrinsic angular momentum operator

$$\hat{\mathbf{j}} = \sum_{K, K'=-3}^3 \hat{\mathbf{j}}_{K, K'} b_K^\dagger b_{K'} \quad (26)$$

establishes a coupling between rotational and vibrational motions and leads to the hybridization of the positive and negative collective bands.

The eigenfunction of the model Hamiltonian can be written as the product of multiphonon configuration states $|n_{K=-3}, \dots, n_{K=3}\rangle$ with the spherical functions $D_{M, K}^I$ ($K = \sum_i K_i n_{K_i}$):

$$\Psi = \sum \psi_{[n_i]} D_{M, K}^I |n_{K=-3}, \dots, n_{K=3}\rangle. \quad (27)$$

The amplitudes $\psi_{[n_i]}$ are found as solutions to the matrix equation

$$(\hat{H}_{\text{intr}} - \Omega \hat{j}_x)[\psi] = \epsilon[\psi] \quad (28)$$

with $\Omega = dE_{\text{rot}}/dI$. The eigenenergies are then equal to

$$E = E_{\text{rot}} + \epsilon. \quad (29)$$

When Ω becomes large (i.e., when the spin increases) it is found that the lowest value of ε corresponding to an aligned superposition of one phonon states becomes negative. This means that at some spin value the one-phonon configurations become yrast states. At still larger values of spin the yrast states correspond to two-phonon configurations and so forth. Due to linear dependence on I of the energy of aligned multiphonon configurations which is weaker than the quadratic dependence on I of the energy of collective rotation, the intervals between the I -even and I -odd states decrease when the angular momentum increases.

However, the hybridization of I -even and I -odd yrast sequences does not proceed in a monotonic way. The quantized nature of the number of phonons and of the angular momentum results, as in the model discussed before, in a staggering of the yrast-states energies.

An analysis of the described system has been performed upon using coherent states $|\lambda\rangle$ such that $b|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ within a variational ansatz for finding the amplitudes ψ_{K_i} in the phonon operator $b = \sum \psi_{K_i} b_{K_i}$. It yields a smooth yrast line corresponding to a renormalized moment of inertia. The quantal staggering is lost within the variational treatment just like in the case considered in previous sections.

Coherent states are not eigenstates of the vibrational angular momentum $\mathbf{j}$ and may be considered as some deformed states. To find out the nature of the deformation which is involved here we associate the boson operators $b_{K_i}^\dagger, b_{K_i}$ with the components of the octupole mass tensor and conjugated to it momentum $p_i \sim i\hbar[T, q_i]$ (T being the kinetic energy operator). Then we find that the optimal shape of the nucleus at high spins involves an octupole $Y_{3,3}$ deformation.

These results published first in Ref.[23] led the authors to conclude that the installation of such a deformation is a potentially general property of nuclei at high spins*.

One cannot expect that such a schematic model may go far in explanation of the high-spin states in atomic nuclei. Anyway, it allowed one to predict an unusual pattern of the spectrum in the nucleus ^{220}Ra soft in respect to the octupole vibrations. In Fig.8 we reproduce the comparison of the experimentally found values of the ratio

$$R = \frac{2E_\gamma((I+1)^- \rightarrow I^+)}{E_\gamma((I+2)^+ \rightarrow I^+)}$$

*That is the property expected at sufficiently high spins which may turn out however to be higher than critical for the fission in some nuclei.

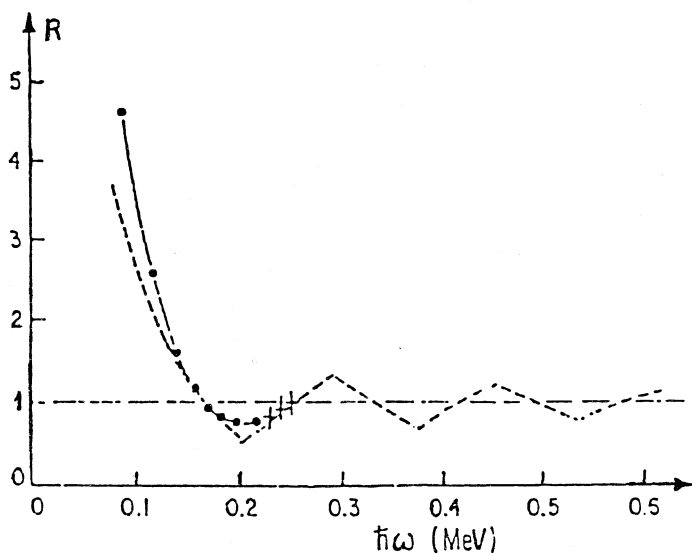


Fig.8. The calculated and experimental transition energy ratios $R = 2E_{\gamma}((I+1)^- \rightarrow I^+)/E_{\gamma}((I+2)^+ \rightarrow I^+)$ in ^{220}Ra . The symbols in the picture stand for: ---•--- experiment [25], ---+--- experiment [26], ----- theory [23],

with the values corresponding to the presented above model. The approach of R to one is taken in the literature as an indication for the break-up of the left-right symmetry of the nuclear mean field. Both the experimental data (the high-spin part of which was obtained about five years after publication of Ref.[23]) and the theory show that the installation of the octupole symmetry is accompanied by some staggering effects with the periodicity having nothing in common with the type of the symmetry involved.

The high-spin superdeformed states are excellent candidates for the search for the deformation of this type, although the model discussed before cannot yield a quantitative prediction here. One knows that an appreciable fraction of the octupole strength is concentrated around the excitation energy [27] of the «low-lying octupole resonance» (LEOR)

$$E_{\text{LEOR}} = \frac{31.4}{A^{1/2}} \sqrt{7/4 - X} \text{ (MeV)}$$

throughout the periodic table (in the above formula $X = Z^2/49A$ is the fissility parameter). In rare earth nuclei this excitation energy becomes equal to the magnitude of the Coriolis coupling between octupole states at the

rotational frequency of about 1 MeV which is not too far from the frequencies found in the superdeformed bands in this region of nuclei.

6. HIGHER-ORDER EFFECTS IN THE ELECTROMAGNETIC RADIATION AS A PROBE OF VORTICAL MOTION

The uniform circulation may manifest itself only in systems with an appreciable quadrupole deformation. Indeed, the «stretched» rotation becomes indistinguishable from the uniform rotation of the matter when the container has a spherical shape. Strictly speaking, it is expected only in ellipsoidally shaped bodies. However, other types of vortical motion may exist also in spherical or slightly deformed nuclei with arbitrary shapes. For example, in spherical nuclei the dipole toroidal motion produces the currents with the velocity field

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}(t) \left(1 - 2 \frac{r^2}{R^2} \right) + (\mathbf{a}(t) \cdot \mathbf{r}) \frac{\mathbf{r}}{R^2}, \quad (30)$$

where $\mathbf{r}$ is a position of a moving liquid element and R is the radius of a sphere representing the nuclear surface. This type of motion is known as the Hill's vortex [5]. The vector $\mathbf{a}(t)$ determines the amplitude and the direction of the Hill's vortex. The lines of current of such a velocity field are shown in the upper right corner in Fig.2. The procedure described in Section 2 gives for the stretched toroidal current in ellipsoidally deformed nuclei the following expression [6]:

$$\mathbf{u} = u_\rho \mathbf{e}_\rho + u_z \mathbf{e}_z \quad (31)$$

with

$$u_\rho = A z \rho, \quad u_z = A \left(b^2 - z^2 - 2 \frac{b^2}{a^2} \rho^2 \right). \quad (32)$$

Here, A is the amplitude of the vortex aligned with the z -axis, a and b are the semiaxes of the ellipsoid determining the surface. The corresponding lines of the current in ellipsoidally deformed nuclei are shown in Fig.9.

Fingerprints of one particular mode of such a motion (toroidal mode) have been already looked for in the data on the nuclear structure for some years already.

The toroidal currents in an electrically charged liquid interact with the transverse electromagnetic field and consequently may influence the dipole-electric transitions between nuclear eigenstates [28]. Strong deviations from predictions of the adiabatic theory for the absolute values of $E1$ -transitions found recently in the multiple Coulomb excitation of ^{226}Ra have been analysed

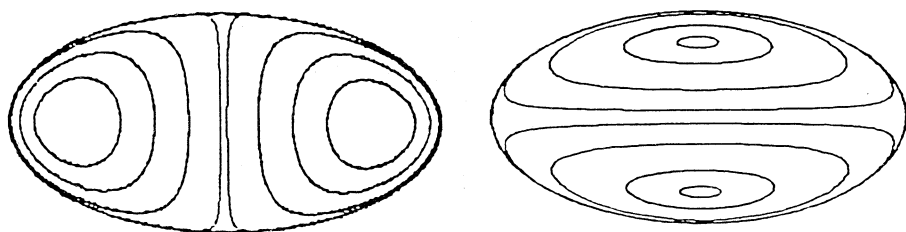


Fig.9. The lines of the current corresponding to the toroidal dipole modes in deformed nuclei: right — the Hill's vortex is aligned with the short axis, left — the Hill's vortex is aligned with the long axis

in order to estimate the contribution of the dipole toroidal moment to the $E1$ transition probabilities [29]. The analysis is performed taking into account the effects of Coriolis coupling between the negative-parity bands and including in the $E1$ transition operator the terms describing the interference of the «pure» electric dipole and toroidal moments. This is done writing for the intrinsic part of the dipole electric operator an expression:

$$M_K \propto \mathbf{d}_K + E_\gamma \mathbf{t}_K.$$

Here, $\mathbf{d}$ is the standard dipole electric moment and $\mathbf{t}$ is the dipole toroidal moment of the nucleus; E_γ is the γ -ray energy.

In Fig.10 we show the best fit of experimental results obtained in this way in comparison with the best fit obtained assuming that the toroidal contribution is absent ($\mathbf{t} = 0$). Here, the «effective electric dipole moment» is given:

$$Q^\mp = \sqrt{\frac{4\pi}{3} \frac{(2I+1)}{(I+1/2) \mp 1/2}} B(E1; I^- \rightarrow (I \mp 1)_{gr}^+)$$

extracted in Ref.[30] from experimental data and calculated from the model. It is seen that the admission of toroidal currents allows one to improve essentially the reproduction of experimental results.

In Ref.[29] the energy weighted sum of matrix elements squared for the toroidal dipole operator is estimated (S_{tor}). A phenomenological treatment shows that the strength of toroidal transitions between the ground and the lowest negative-parity band is rather large: $|\langle 1^- | \mathbf{t} | gr \rangle|^2 (E^{1^-} - E^{gr}) \simeq 0.13 S_{\text{tor}}$. This allows one to think that the collective toroidal current plays an important role in the structure of the lowest negative-parity band in ^{226}Ra . Such a conclusion

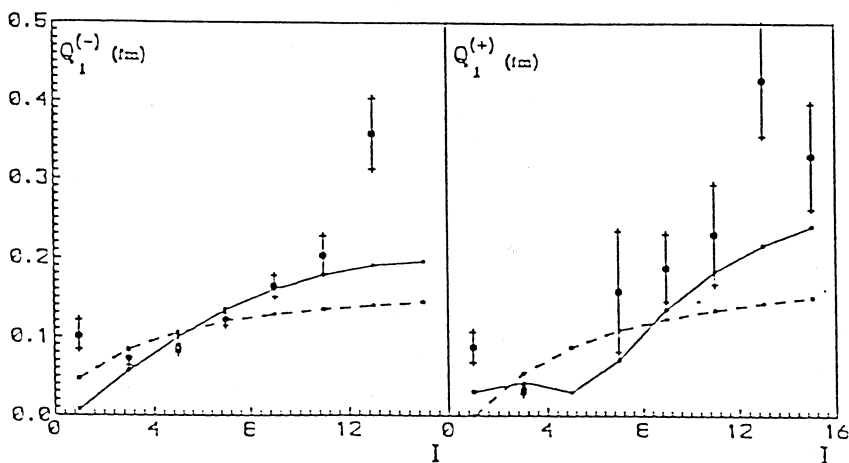


Fig.10. Comparison of the «effective» dipole moments $Q^{\pm}$ extracted from the experimental data and calculated admitting toroidal contributions to the transition matrix element (full line) and without such contributions (broken line)

calls for verifications which could be done by analysing both theoretically and experimentally the internal conversion process accompanying the nuclear transitions studied in this paper. Indeed, the internal conversion coefficients give an independent test of the presence of such currents.

7. ANALOGY WITH THE AHARONOV-BOHM EFFECT

We want to give here an image of the phenomena discussed before somewhat different from previously presented. The emphasis of our communication is made on collective motions which do not change the distribution of the matter in space. The existence of such motions in macrophysics does not need any proof: with a very tiny idealization of the reality, one may think that the electric current in an ordinary conductor is not related with any changes in the electric circuit. The amplitude of the current may be regulated at one's desire and may be considered as one of the parameters determining the physical state of the circuit. Certainly, intrinsic vortical currents exist in microscopic systems like atomic nuclei. The value of the moment of inertia of deformed nuclei indicates that the motion involved in the collective rotation is different from the global (rigid body) rotation. Magnetic properties of spherical nuclei reflect the presence of currents yielding a circulation of the nuclear matter. The

previous section has also given an evidence for the dipole toroidal currents in heavy nuclei.

Still a rather fundamental question concerning the vortical currents in microscopic systems may be raised: may such currents represent, or not, degrees of freedom independent from those which are associated with the distribution of the matter in the space? Such a question is prompted by the following simplistic consideration. In quantal systems consisting of identical particles one could think that their (infinitesimally slow) displacements would affect the physical state only inasmuch as by changing the distribution of the matter. Arguing like this, one may say that the second of the transformations considered in **Section 2** (the S-transformation in eq.(1)) must be considered as unphysical in application to atomic nuclei, and all theoretical constructions based on it are erroneous. However, this argument fails in the case of the time-dependent transformations, because the latter reflect the changes of the particle distribution in the momentum space. The state Ψ' satisfying the generalized cranking equation (4) is quite different from the one corresponding to the same distribution of the matter in space but which is obtained using a variational approach involving only time-even constraints.

The wave function describing the stationary motion contains a time-dependent phase factor (see eq.(5)). It is precisely the place, where the motion generating parameters appear. Representing no measurable quantities in the sense of classical picture, such parameters play an important role in the quantal description of the motion. These aspects of the theory have been shown in this paper for the case of the motion involving the Kelvin circulation. In fact, such aspects of the theory are well known in the literature : they play the central role in the so-called Aharonov-Bohm effect [31,32,33]. The latter concerns the reaction of the quantal system on the electromagnetic field in special circumstances when the electromagnetic field is localized in the region inattainable to a charged particle but affects the phase of its wave function through the electromagnetic potentials (the scalar potential and especially the vector potential $\mathbf{A}$). When the charged particle passes the region of a nonvanishing value of $\mathbf{A}$ the presence of a remote electromagnetic field manifests itself by a variety of interference effects.

The Aharonov-Bohm effect stems from the accentuation of the role of the phase of the wave-function: the changes in physical arrangements responsible for the changes of the phase of the wave function may lead to measurable effects even in cases when such effects are not expected for classical systems. The model suggested in this paper for the explanation of the energy staggering in superdeformed bands gives a new example of such a situation.

Since the publication of the paper by Y. Aharonov and D. Bohm, a number of possible experiments has been discussed in which the phase of the wave function plays an unexpected role. In particular, there was considered a system consisting of an electron in a circular circuit placed in the static magnetic field. If the circuit is infinitely thin and the electron-ion interaction is absent the quantum state of an electron is given by the Schroedinger equation with the Hamiltonian

$$\hat{H}_e = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_\theta - \frac{eA}{c} \right)^2 \quad (33)$$

with

$$\hat{p}_\theta = \frac{\hbar}{iR} \frac{\partial}{\partial \theta},$$

where R is the radius of the circuit. Naturally, the solutions of the Schroedinger equation are

$$\psi_n(\theta) = \sqrt{1/2\pi} \exp \left[i(Rk_n \theta - \frac{e}{\hbar c} \int_0^\theta d\mathbf{l}(\theta') \mathbf{A}(\theta')) \right]$$

with k_n quantum numbers determined by the boundary periodicity conditions:

$$2\pi Rk_n - \frac{e}{\hbar c} \Phi = 2\pi n, \quad (34)$$

where, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, and

$$\Phi = \int_c d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A} = \int_s d\mathbf{s} \cdot \mathbf{H} \quad (35)$$

is the magnetic flux passing through the circuit.

The energy of the electron in the quantum state n

$$E = \bar{H}_e = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m}$$

does not depend in an explicit way on the magnetic field. However, the allowed values of k_n depend on the flux according to eq. (34). In particular, the ground state energy is not necessarily equal to zero whenever there is a nonvanishing magnetic flux through the circuit. Indeed the lowest $|k_n|$ value is either

$$k_0 = \frac{1}{R} \left(\left[\frac{e}{\hbar c} \Phi \right] - \frac{e}{\hbar c} \Phi \right)$$

or $k_0 - 1$ (here $[x]$ means the integer part of x and it is assumed that $\Phi \geq 0$). Thus, the energy of the lowest state is a «staggering» function of the flux.

The energy staggering in the electric circuit is accompanied by the presence of an electric current whose magnitude depends non-monotonically on the magnetic flux Φ . The magnitude of the current is equal to

$$(j_{el})_n = \frac{\hbar e}{m} k_n.$$

From the above discussion it follows that whenever $\Phi/(e/hc)$ is not an integer, one expects to register the permanent electric current in the circuit (even when it is in its ground state). Very fine recent experiments on Superconducting Quantum Interference Devices (SQUID) representing electric «mesoscopic» chains with the size of the order of $3\mu\text{m}$ show indeed the presence of such currents [34], [35].

It is easy to establish parallels between the model of **Section 3** describing the irregularities in superdeformed bands with the system discussed in the previous paragraphs. To do it, we examine in a slightly different way the Hamiltonian in eq.(13) to which we add a term describing the coupling of the rotational degrees of freedom with the degrees of freedom of the intrinsic motion:

$$\hat{H} = \hbar^2 \lambda_1 \left(\frac{A_1}{2} \hat{\mathbf{I}}^2 - B_1 \hat{\mathbf{I}} \hat{\mathbf{J}} + \frac{C_1}{2} \hat{\mathbf{J}}^2 \right) + \hbar^2 \hat{h}' + V_{\text{coupl}} \quad (36)$$

assuming that $[\hat{\mathbf{I}}, V_{\text{coupl}}] = 0$. The eigenfunctions have exact angular momentum quantum numbers (I and M) and may be written in the usual way as superpositions of states with definite projection of the angular momentum on a quantization axis. Choosing the latter as the axis of rotation yields the expansion of the wave function in the spherical harmonics $D_{M,K}^I(\Theta)$ depending on the orientation of the system in space :

$$\Psi_{I,M} = \sum_n D_{M,I-n}^I(\Theta) \Psi_n. \quad (37)$$

We represent the eigenfunction $\Psi_{I,M}$ as a column vector (dropping the I and M indices)

$$\Psi_{I,M} \rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (38)$$

and write the Schroedinger equation in a matrix form

$$\hat{H}_I \Psi = E_I \Psi. \quad (39)$$

The state Ψ having a fixed angular momentum quantum number I , the projected Hamiltonian $\hat{H}_I$ is

$$\hat{H}_I = \hbar^2 \left(\frac{A_1}{2} I(I+1) - B_1(I - \hat{n}) \hat{J}_1 + \frac{C_1}{2} \hat{J}^2 + \hat{h}_I \right) + V_{\text{coupl}}. \quad (40)$$

As a starting point we make the same approximation as in **Section 4**. We neglect the terms $\hat{h}_I'$ and V_{coupl} . The first of them contributes to the precessional motion while the second describes the J -mixing. Then the I and K quantum numbers are conserved:

$$\hat{J}^2 \Psi = I(I+1) \Psi, \quad \hat{n} \Psi = n \Psi, \quad K = I - n.$$

In this case the dynamical equation for Ψ becomes:

$$(\hat{H}_{\text{stag}} + \hbar^2 B_1(I - n_p) \hat{n}_J) \Psi = \Delta E(I) \Psi, \quad (41)$$

where

$$\begin{aligned} \Delta E_I &= E(I) - \overline{E(I)} \\ \overline{E(I)} &= \frac{\hbar^2}{2} \left(A_1 I(I+1) - \frac{B_1^2}{C_1} (I - n_p)^2 \right) \end{aligned} \quad (42)$$

and also

$$\hat{H}_{\text{stag}} = \frac{\hbar^2 C_1}{2} \left(\hat{J} - \frac{B_1}{C_1} (I - n_p) \right)^2. \quad (43)$$

The solution for $\Delta E(I)$ is

$$\Delta E(I) = \frac{\hbar^2 C_1}{2} \left(J - \frac{B_1}{C_1} (I - n_p) \right)^2 + \hbar^2 B_1(I - n_p) n_J. \quad (44)$$

When $n_I = n_J = 0$ one easily recognises in the last expressions the results presented in **Section 3** and **4** for the smooth and staggering parts of the energy of the system in which the quantized Kelvin circulation is coupled with the global rotation.

The Hamiltonians in eq. (33) and eq. (43) have an important property in common: they represent positive definite operators each depending on the

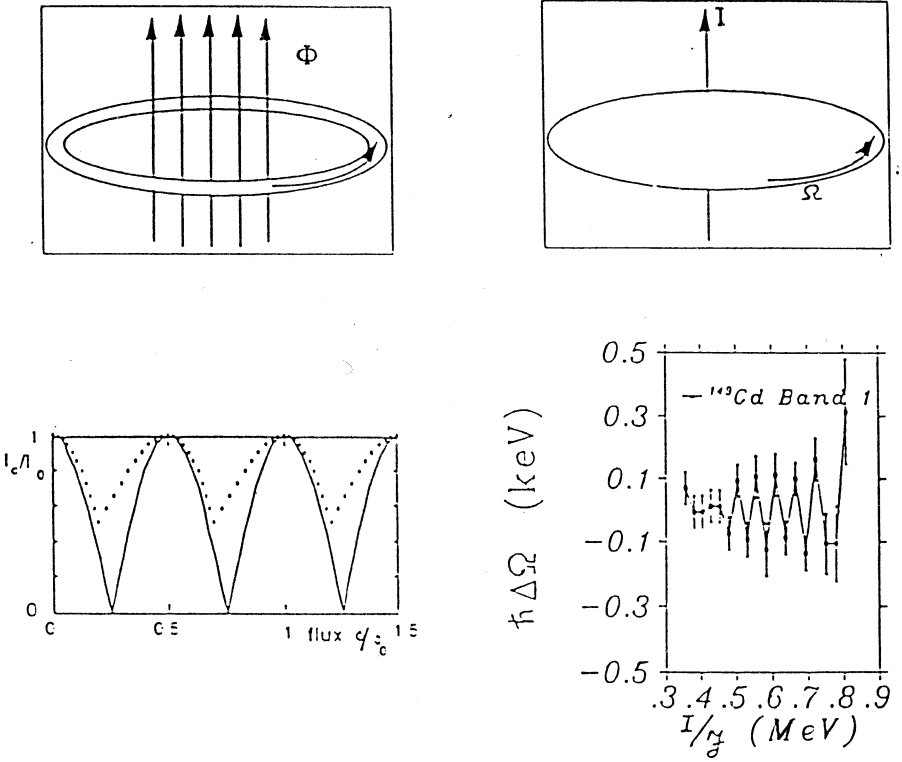


Fig.11. Parallels in the properties of mesoscopic conducting rings (left side) and the rotational motion in the nuclear model with quantized Kelvin circulation (right side). See explanation in the text

difference of a quantized quantity ($\hat{J}$ and $\hat{p}_\theta$ correspondingly) and an «external» parameter (I and A). For these reasons the «ground state energy» as a function of the corresponding «external» parameter has repetitive kinks following the quantal changes in the ground state wave function. The possible relation of such kinks with the observed $\Delta I = 4$ energy staggering has been already discussed in this paper. The experimental proof for the existence of such kinks in the electric circuit has also been given, although the direct measurements of the energy of a circuit with the precision necessary to register the tiny quantal effects turn out to be impossible. The proof of the considered phenomenon has been done measuring the accompanying electric current.

The parallels between the energy staggering in the superdeformed bands and the permanent electric currents are illustrated in Fig.11. The upper part of the figure shows the two quantal systems considered before (the «mesoscopic» electric chain in the magnetic field at the left and the rotating nucleus with vortical currents at the right). The lower part of the figure presents the quantal phenomena establishing the similarity of the two systems. The permanent electric currents in SQUIDS (solid line for an ideal «symmetric» SQUID and dotted line for the real SQUID with finite inductivity) are shown on the left side of the picture. At the right we reproduce once more the data concerning the energy staggering in the superdeformed band in ^{149}Gd explained in **Section 3** within the model of a vortical motion coupled with the global rotation.

One may go much further in studying parallels in the properties of these two kinds of systems. One may establish a similarity of effects produced by the finite width of an electric circuit and of the precessional motion in the nuclear model presented in **Section 3**. Both factors are related with the activation of an additional degree of freedom. If the possibility of a motion in an additional direction is open then the closed orbitals may be destroyed and thus the kinks may be diminished. One may see the similarity between the « J » and « k_n » mixing in the corresponding models. The mixing of these quantum numbers diminishes the role of the limiting conditions and also diminishes the amplitude of the kinks.

8. CONCLUDING REMARKS

To conclude we may refer once more to Figure 1 picturing an oldish man looking for the treasure in a pool of water. The particular pool in which we have dwelt here may look to some readers rather shallow and its waters much disturbed by the previous passage of so many gold searchers. It is our prejudice however that whatever the fate of some tentative explanations proposed here might ultimately be, taking into account in a systematic way of the dynamics associated with shape conserving collective currents is a rich field of investigations deserving a particular attention.

As a matter of fact we have considered here mostly but not exclusively a particular type of such motions namely the uniform intrinsic vortical modes whose classical analogues are the S -type Riemann ellipsoids. Their quantization has yielded such interesting spectroscopic features as the regular presence of kinks in the energies of the yrast states. Even though our proposition of such a

phenomenon to explain the observed $\Delta I=4$ staggering still remains to be confirmed, it is not without significance that it may be ascribed as an analogue of the Aharonov-Bohm effect in rotating nuclei.

The influence of the breaking of axial symmetry as well as intrinsic parity symmetry has also been discussed. Under some reasonable model assumptions, breaking these symmetries one retrieves, roughly speaking, the same coupling scheme of collective modes and therefore the same type of spectroscopic properties as in axially and reflection invariant nuclei.

We have sketched also some directions of further work which go beyond the uniform intrinsic vortical motion either by considering more complicated intrinsic vortical modes or by explicitly taking into account the mixing of the Kelvin circulation quantum number.

Altogether most of our ideas brought up in the present review call for an assessment through specific microscopic calculations. In particular the crucial role of pairing correlations should be studied in a detailed fashion. Such studies will without any doubt illustrate new facets of the rich dynamical behavior of the atomic nuclei considered as small quantal fermionic droplets.

This paper is dedicated to Professor Vadim G. Soloviev not only for many illuminating scientific discussions on various aspects of nuclear collective motion but also for his constant example of positive, enthusiastic and deep attitude in front of the challenging and sometimes overwhelming body of nuclear spectroscopic data.

We have benefitted from the interaction with many experimentalists, among which we would like to thank specially B.Cederwall, B.Haas, F.Hannachi, M.Meyer and F.Stephens for discussions on superdeformed states and the $\Delta I=4$ staggering, as well as with many theoreticians with a special mention of E.Nadjakov, M.Cerkaski and G.Rosensteel.

This work is based upon the results from a collaboration which has been possible through an agreement between the **IN2P3** of France and **JINR** in Dubna (Russia) which is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. **Rowe D.R.** — Nucl.Phys., 1980, A347, p.409—416.
2. **Mikhailov I.N., Quentin P.** — Preprint CSNSM 25-94, submitted to Nucl. Phys. A, 1994.
3. **Mikhailov I.N., Quentin P.** — Proc. Int. Conf. on Selected Topics in Nuclear Structure. Ed. V.G.Soloviev, Dubna, 1994, JINR, E4-94-370, Dubna, 1994, p.399.

4. **Mikhailov I.N., Quentin P.** — Proc. Int. Conf. on Physics from Large γ -Ray Detector Arrays, pp.34-39, Berkeley, California, USA (August 1994).
5. **Sir H. Lamb** — Hydrodynamics, Cambridge Univ. Press (1975).
6. **Kartavenko V.G., Mikhailov I.N., Quentin P.** — paper in preparation.
7. **Varshalovich D.A., Moskalev A.N., Khersonskii V.K.** — Quantum Theory of Angular Momentum, World Scientific Publishing, 1988.
8. **Chandrasekhar S.** — Ellipsoidal Figures of Equilibrium, Dover, New York, 1987.
9. **Mikhailov I.N., Quentin P.** — Phys. Rev. Lett., 1995, 74, p.3336.
10. **Rosensteel G., Rowe D.J.** — Phys. Rev. Lett., 1981, 46, p.1119.
11. **Rosensteel G.** — Ann. Rhys. (N.Y.), 1988, 186, p.230.
12. **Rosensteel G.** — Phys. Rev. C, 1992, 46, p.1818.
13. **Cusson R.Y.** — Nucl. Phys., 1968, A114, p.286; **Weaver O.L., Cusson R.Y., Biedenharn L.C.** — Ann.Phys. (N.Y.), 1976, 102, p.493; **Buck B., Biedenharn L.C., Cusson R.Y.** — Nucl. Phys., 1979, A317, p.205.
14. **Kramer P.** — Ann. Phys. (N.Y.), 1982, 141, pp.254, 269.
15. **Cerkaski M., Mikhailov I.N.** — Ann. of Phys., 1993, 223, p.151.
16. **Flibotte S. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1993, 71, p.4299.
17. **Cederwall B. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1994, 72, p.3150.
18. **Cederwall B.** — Proc. Int. Conf. on Physics from Large γ -Ray Detector Arrays, Berkeley, California, USA (August 1994) and private communication.
19. **Mottelson B.** — Proc. Int. Conf. on Physics from Large γ -Ray Detector Arrays, Berkeley, California, USA (August 1994); **Hamamoto I., Mottelson B.** — to be published in Phys. Lett..
20. **Pavlichenkov I.M.** — Proc. Int. Conf. on Physics from Large γ -Ray Detector Arrays, pp.14-18, Berkeley, California, USA (August 1994); **Pavlichenkov I.M.** — Phys. Rep., 1993, 226, p.173.
21. **Bohr A., Mottelson Ben.R.** — Nuclear Theory, v.2, ch. 4 (Benjamin) New York, Amsterdam, 1974.
22. **Landau L.D., Lifshitz E.M.** — Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory, Mir, Moscow 1965.
23. **Briancon Ch., Mikhailov I.N.** — In: «Nuclear Structure» (Proc. Int. School of Physics on Nuclear Structure, Alushta, October 1985); ed. V.G.Soloviev and Yu.P.Popov, JINR publication D4-85-851, p. 245; Nuclear Structure, Reactions and Symmetry, vol.1 p. 131, ed. R.A. Meyer and V. Paar, World Scientific (1986).
24. **Simon R.S., DeVito R.P., Emling H. et al.** — Phys. Lett., 1982, 108B, p.87.
25. **Celler A., Briancon Ch., Dionisio J.S. et al.** — Nucl. Phys., 1985, A432, p.421.
26. **Aiche M., Briancon Ch., Kulessa R. et al.** — CSNSM Activity Report 1990—1992, p.30.
27. **Balbutsev E.B., Mikhailov I.N.** — J. Phys., 1988, G14, p.545.
28. **Dubovik V.M., Tosunian L.A.** — Particles and Nuclei (Journal of JINR, Dubna, Russia), 1983, Vol.14, p.1193.
29. **Mikhailov I.N., Usmanov Ph., Briancon Ch.** — JINR preprint P4-94-229, Dubna, 1994, to be published in Sov. Nucl. Phys. (April-May 1995).
30. **Wollersheim H.J. et al.** — Nucl. Phys., 1993, A556, p.261.
31. **Aharonov Y., Bohm D.** — Phys. Rev., 1959, 115, p.485.

32. **Aharonov Y., Coleman S., Goldhaber A.S. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1994, 73 p.918.
33. **Peshkin M., Tonomura A.** — The Aharonov-Bohm Effect, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
34. **Levy L.P., Dolan G., Dunsmuir J., Buochiat H.** — Phys. Rev. Lett., 1990, 64, p.2074.
35. **Maily D., Chapelier C., Benoit A.** — Phys. Rev. Lett., 1993, 70 p.2020.

ПОСТРОЕНИЕ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ ЯДЕРНОЙ МОДЕЛИ ДВУХ РОТАТОРОВ В ПРОСТРАНСТВЕ ФОКА — БАРГМАНА

И.С.Доценко, Г.Ф.Филиппов

Институт теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова НАН Украины, Киев, Украина

На основе микроскопического подхода предлагается конструктивный метод построения базисных функций ядерной модели двух аксиальных ротаторов в явном виде. Рассматриваемая модель интерпретируется как обобщение модели $SU(3)$ Эллиота, при этом базис последней расширяется до базиса прямого произведения $SU(3) \times SU(3)$. Решение поставленной задачи облегчается процедурой отображения функций и операторов в пространстве Фока — Баргмана. В этом пространстве в явном виде получены выражения для операторов Казимира второго порядка группы $SU(3)$ и оператор Баргмана — Мошинского. Волновые функции модели в конечном счете выражены через гипергеометрические функции и сферические функции Вигнера. Рассмотрена также процедура выделения эллиотовских состояний из полного набора построенных функций. Возможно расширение области применимости полученного базиса.

Within the microscopic approach a constructive method is proposed to build the basis functions of the nuclear model of two axial rotators. The model is interpreted as the generalization of the Elliott $SU(3)$ model the basis of which is extended to the basis of the direct product $SU(3) \times SU(3)$. The solution of the problem is alleviated by using the mapping of functions and operators into the Fock — Bargmann space where the expressions for the second-order Casimir operator for the $SU(3)$ group and the Bargmann — Moshinsky operator are obtained. The wave functions of the model are expressed in terms of the hyperspherical functions and the spherical Wigner functions. The procedure of separating the so-called Elliott states from the complete set of basis states is considered. The possible applications of the obtained basis are also discussed.

1. ВВЕДЕНИЕ

В обзоре рассматривается метод построения волновых функций в ядерной модели двух ротаторов на основе микроскопического подхода и исследуются основные свойства этих функций. При этом главное внимание уделяется формальному аспекту проблемы; исключение составляют введение и

частично второй раздел, в которых рассматривается также физическая постановка задачи.

Важная особенность излагаемого ниже подхода состоит в обращении к пространству Фока — Баргмана, в котором базисные функции модели имеют простой вид. Переход к этому пространству осуществляется с помощью волновых пакетов, генерирующих полный базис модели, а два векторных параметра волновых пакетов становятся независимыми переменными в пространстве Фока — Баргмана.

Модель двух аксиальных ротаторов, в феноменологической интерпретации, была предложена в [1—3] и рассматривалась затем в работах других авторов (см., например, [4—7]). Предлагаемый в данной работе подход назван нами микроскопическим, поскольку исходными конструктивными элементами волновых функций ядра, как и в [6,7], являются одночастичные функции гармонического осциллятора, зависящие от пространственных координат и спин-изоспиновых переменных отдельных нуклонов. Состояния ядер, в зависимости от их классификации, описываются определенными линейными комбинациями произведений таких одночастичных функций.

В работе [8] было показано, что динамику одного, вообще говоря, неаксиального, ротатора можно описать на основе микроскопической модели $SU(3)$ Эллиота [9]. Это позволяет надеяться, что в рассматриваемом нами случае можно также существенно использовать классификацию состояний в соответствии с их (λ, μ) -симметрией. Однако модель Эллиота описывает динамику всего лишь трех коллективных степеней свободы валентных нуклонов, в то время как в случае двух ротаторов число степеней свободы может принимать значения от четырех (аксиальные ротаторы) до шести. Отсюда следует необходимость расширения базиса модели Эллиота и введения новой классификации нуклонных конфигураций. В предлагаемой нами классификации используются индексы $SU(3)$ -симметрии отдельно для системы нейтронов (λ_n, μ_n) и системы протонов (λ_p, μ_p) . Построенная таким способом совокупность состояний образует базис прямого произведения $SU(3) \times SU(3)$ двух групп. Последующая редукция $SU(3) \times SU(3)$ на группу $SU(3)$ позволяет пометать волновые функции квантовыми числами (λ, μ) , характеризующими $SU(3)$ -симметрию нейтрон-протонной системы в целом. Таким образом, в рассматриваемой модели состояния идентифицируются следующим набором квантовых чисел: (λ_n, μ_n) , (λ_p, μ_p) , (λ, μ) и K, L, M . Величины K, L, M аналогичны квантовым числам состояний жесткого ротатора, для которого L — угловой момент, K — проекция момента на собственную ось ротатора, M — проекция момента на внешнюю ось. Квантовое число K , вообще говоря, не является интегралом движения в рассматриваемой модели, и поэтому волновая функция представляет собой суперпозицию состояний с различными значениями K . Для обеспечения аксиаль-

ной симметрии нейтронной и протонной подсистем значения квантовых чисел, характеризующих $SU(3)$ -симметрию подсистем, выбираются в виде $(\lambda_n, \mu_n) = (n_1, 0)$, $(\lambda_p, \mu_p) = (n_2, 0)$. Пара чисел (λ, μ) , характеризующая симметрию всей протон-нейтронной системы, может принимать значения $(n_1 + n_2, 0)$, $(n_1 + n_2 - 2, 1), \dots, (n_1 - n_2, n_2)$. (Для определенности будем считать, что $n_2 < n_1$).

Как показал Эллиот [9], неприводимое представление (λ, μ) редуцируется на неприводимые представления группы трехмерных вращений R_3 со следующими значениями углового момента: $L = N, N + 1, N + 2, \dots, N + B$, где $N = \min \{\lambda, \mu\}$; $\min \{\lambda, \mu\} - 2$; $\min \{\lambda, \mu\} - 4$; $\dots$; 1 или 0, $B = \max \{\lambda, \mu\}$, исключение составляет случай $N = 0$, когда $L = B$; $B - 2$; $\dots$; 1 или 0.

Перечисленных квантовых чисел оказывается достаточно для однозначной идентификации волновых функций, если $\lambda < 2$, либо $\mu < 2$. При $\lambda \geq 2$ и $\mu \geq 2$ возникает необходимость в дополнительном квантовом числе, в качестве которого можно взять, например, интеграл Баргмана — Мошинского ω [10]. В дальнейшем искомые волновые функции будем обозначать в виде $|(\lambda, \mu) LM\rangle$, опуская для краткости квантовые числа $\lambda_n = n_1$ и $\lambda_p = n_2$.

2. МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИЙ И ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФОКА — БАРГМАНА

Как уже отмечалось выше, волновые функции $|(\lambda, \mu) LM\rangle$ представляют собой определенные линейные комбинации произведений осцилляторных функций, зависящих от пространственных координат, и спин-изоспиновых переменных отдельных нуклонов. Известно, что нахождение в явном виде многочастичных волновых функций с заданными квантовыми числами представляет собой, вообще говоря, нетривиальную задачу. Адекватное описание ядерных состояний существенно упрощается, если перейти от функций, зависящих от координат частиц, к их образам в пространстве Фока — Баргмана [11]. По существу, при отображении функций на их образы происходит выделение динамических переменных модели и как бы «замораживание» тех степеней свободы, которые не затрагиваются при рассматриваемых в этой модели возбуждениях.

Процедуру отображения функций и операторов в общем виде можно представить следующим образом.

Обозначим $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$ тройку единичных взаимно ортогональных векторов, и $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ — другую аналогичную тройку. Используя эти векторы,

запишем в инвариантном виде нормированные трехмерные одночастичные функции гармонического осциллятора с учетом их зависимости от спин-изоспиновых переменных нуклона:

$$\Psi_{q_1, q_2, q_3}(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{r}, \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{r}, \mathbf{u}_3 \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2^{q_1 + q_2 + q_3} \cdot q_1! q_2! q_3! \cdot \pi^{3/2}}} \times \\ \times H_{q_1}(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{r}) H_{q_2}(\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{r}) H_{q_3}(\mathbf{u}_3 \cdot \mathbf{r}) e^{-r^2/2} \chi_\mu \tau_{1/2}, \quad (2.1)$$

$$\Psi_{q_1, q_2, q_3}(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{r}, \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{r}, \mathbf{v}_3 \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2^{q_1 + q_2 + q_3} \cdot q_1! q_2! q_3! \cdot \pi^{3/2}}} \times \\ \times H_{q_1}(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{r}) H_{q_2}(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{r}) H_{q_3}(\mathbf{v}_3 \cdot \mathbf{r}) e^{-r^2/2} \chi_\mu \tau_{-1/2}, \quad (2.2)$$

где $H_{q_i}(z)$ — полиномы Чебышева — Эрмита, а $\mu = \pm 1/2$ — проекция спина нуклона на ось квантования. Функции (2.1) описывают состояния протона, а функции (2.2) — состояния нейтрона, что определяется значением проекции изотопического спина в них (τ_v — изоспиновая функция). Отметим, что в системе координат, в которой оси x , y и z направлены вдоль векторов $\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_2$ и $\mathbf{u}_3$, координатная часть функции (2.1) имеет вид произведения трех одномерных осцилляторных функций, каждая из которых зависит от одной из декартовых координат x , y или z . Если же направления осей задаются векторами $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ и $\mathbf{v}_3$, то такой вид будет иметь координатная часть функции (2.2).

Все одночастичные состояния (2.1) и (2.2) с одним и тем же значением полного числа осцилляторных квантов $q = q_1 + q_2 + q_3$ будем считать, как это принято в оболочечной модели ядра, принадлежащими одной и той же оболочке. В данной работе рассматриваются только такие конфигурации, в которых незаполненной (открытой) является лишь внешняя оболочка, т.е. оболочка с наибольшим значением квантового числа q . Для иллюстрации в табл.1 записан порядок заполнения оболочек для атомных ядер ${}^8_4\text{Be}$, ${}^{20}_{10}\text{Ne}$, ${}^{44}_{22}\text{Ti}$, у которых во внешней оболочке имеется по два протона и два нейтрона. Каждой паре квадратных скобок в приведенной таблице соответствует конкретный вид одночастичной волновой функции с заданным набором чисел осцилляторных квантов q_1 , q_2 , q_3 . Верхний индекс за квадратными скобками означает число нуклонов в данном состоянии, а нижний индекс

равен 1 или 2, в зависимости от того, какой вид, (2.1) или (2.2), имеет одночастичная функция.

Таблица 1. Порядок заполнения нуклонами ядерных оболочек в рассматриваемой модели

Ядро	Порядок заполнения оболочек
${}^8_4\text{Be}$	$\left\{ \begin{array}{l} [000]_1^2 \quad [100]_1^2 \\ [000]_2^2 \quad [100]_2^2 \end{array} \right.$
${}^{20}_{10}\text{Ne}$	$\left\{ \begin{array}{l} [000]_1^2 \quad [100]_1^2 \quad [010]_1^2 \quad [001]_1^2 \quad [200]_1^2 \\ [000]_2^2 \quad [100]_2^2 \quad [010]_2^2 \quad [001]_2^2 \quad [200]_2^2 \end{array} \right.$
${}^{44}_{22}\text{Ti}$	$\left\{ \begin{array}{l} [000]_1^2 \quad [100]_1^2 \quad [010]_1^2 \quad [001]_1^2 \quad [200]_1^2 \quad \dots \quad [011]_1^2 \quad [300]_1^2 \\ [000]_2^2 \quad [100]_2^2 \quad [010]_2^2 \quad [001]_2^2 \quad [200]_2^2 \quad \dots \quad [011]_2^2 \quad [300]_2^2 \end{array} \right.$

Перечислим основные свойства одночастичных функций:

- две функции с различными спиновыми или изоспиновыми квантовыми числами ортогональны друг другу;
- две функции, относящиеся к разным оболочкам, ортогональны;
- координатные части двух функций с разными наборами чисел q_1, q_2, q_3 ортогональны друг другу, если они обе имеют вид (2.1) и (2.2);

— координатные части двух функций, из которых одна имеет вид (2.1), а другая — (2.2), вообще говоря, не ортогональны друг другу, если они относятся к одной и той же оболочке (т.е., если полное число осцилляторных квантов q у них одинаково).

Очевидно, что заполненные оболочки с одночастичными функциями (2.1) и (2.2) сферически-симметричны. Следовательно, форма ядра полностью определяется конфигурацией нуклонов во внешней незаполненной оболочке. Нуклоны внешней оболочки принято называть валентными нуклонами, по аналогии с валентными электронами в атомах.

Обратим теперь внимание на то обстоятельство, что у всех трех ядер, ${}^8_4\text{Be}$, ${}^{20}_{10}\text{Ne}$, ${}^{44}_{22}\text{Ti}$, приведенных в табл.1, конфигурации внешней оболочки имеют вид $[q_1 00]$. Следовательно, полиномы Чебышева — Эрмита в (2.1) не зависят от векторов $\mathbf{u}_2$ и $\mathbf{u}_3$, и так как экспоненциальная часть этой функции сферически-симметрична, то в целом функция (2.1) инвариантна относительно поворотов вокруг оси, направленной по вектору $\mathbf{u}_1$. Это означает, что пространственное распределение совокупности всех протонов ядра име-

ет осевую симметрию, причем ориентация оси симметрии задается вектором $\mathbf{u}_1$. Аналогичные рассуждения позволяют сделать вывод о том, что для рассматриваемых конфигураций распределение нейтронов также аксиально-симметрично, с осью симметрии, направленной по $\mathbf{v}_1$. Числа n_1 и n_2 , через которые выражается квантовое число λ , равны произведению числа осцилляторных квантов q_1 в соответствующей (нейтронной или протонной) внешней оболочке на число соответствующих нуклонов в этой оболочке.

Рассмотрим теперь многочастичные функции в виде детерминантов Слэтера, элементами которых являются одночастичные осцилляторные функции типа (2.1) и (2.2). Для каждого конкретного ядра множество различных одночастичных функций в детерминанте определяется соответствующей оболочечной конфигурацией. Несомненным достоинством многочастичной функции, записанной в виде детерминанта Слэтера, является автоматическое выполнение в ней фундаментального принципа Паули и возможность отделения координаты центра масс системы нуклонов, что позволяет трактовать модель как трансляционно-инвариантную. Для рассматриваемых здесь конкретных оболочечных конфигураций функции-детерминанты характеризуются определенной $SU(3)$ -симметрией нейтронных и протонных подсистем с квантовыми числами вида $(\lambda_p, 0)$ и $(\lambda_n, 0)$, однако при этом нейтрон-протонная система в целом не обладает определенной $SU(3)$ -симметрией, и, следовательно, квантовые числа (λ, μ) не являются интегралами движения. Кроме того, в этих состояниях не имеют определенного значения полный момент системы L и его проекция M на внешнюю ось квантования.

Известно, однако [12], что детерминант Слэтера, составленный из одночастичных функций, является производящей функцией, «генерирующей» состояния $|(\lambda, \mu) LM\rangle$ с необходимыми в рассматриваемой модели квантовыми числами. Для оболочечных конфигураций с аксиально-симметричными нейтронными и протонными подсистемами производящая функция зависит от двух единичных векторов $\mathbf{u} = \mathbf{u}_1$ и $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1$, т.е. от четырех независимых параметров.

В качестве нового набора параметров выберем три угла Эйлера α, β, γ , задающие ориентацию в пространстве «внутренней» системы координат, построенной на векторах $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$, а также параметр $t = \cos \theta$, где θ — угол между направлениями векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$. Обозначим через r — множество переменных $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A\}$, от которых зависят волновые функции ядра, Ω — совокупность параметров $\{\alpha, \beta, \gamma, \theta\}$. Тогда разложение протон-нейтронной производящей функции $\Psi(r, \Omega)$ по состояниям с определенной (λ, μ) -симметрией и определенным значением момента можно записать в следующем виде:

$$\Psi(r, \Omega) = \sum_{(\lambda\mu) LM} \langle r | (\lambda, \mu) LM \rangle \langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle. \quad (2.3)$$

Функцию $\langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle$, зависящую от коллективных динамических переменных $\alpha, \beta, \gamma, \theta$, будем называть «образом» функции $\langle r | (\lambda, \mu) LM \rangle$, зависящей от координат отдельных нуклонов. «Образ» содержит в себе ту часть информации оригинала, которая касается динамики валентных нуклонов в рамках модели двух аксиальных ротаторов. Пространство, в котором определены образы, называется пространством Фока — Баргмана [11]. Преобразование функций влечет за собой преобразование операторов, и, следовательно, необходимо сформулировать правило, позволяющее каждому оператору ставить в соответствие некий образ, действующий на функции, зависящие от переменных Ω .

Оператор $\hat{F}(\Omega)$ будем называть по определению образом оператора $F(r)$, если тождественно выполняется следующее равенство:

$$\langle \Psi(r, \Omega) | \hat{F}(\Omega) | \Psi(r, \Omega) \rangle = \langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \hat{F}(r) | \Psi(r, \Omega) \rangle, \quad (2.4)$$

где скобки означают интегрирование по координатам $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A$ и суммирование по спин-изоспиновым переменным нуклонов, а функция $\Psi(r, \tilde{\Omega})$ совпадает с производящей функцией $\Psi(r, \Omega)$ с точностью до формального переобозначения $\Omega \rightarrow \tilde{\Omega}$. Упростим написание математических выражений, заменив обозначение совокупности квантовых чисел $\{(\lambda, \mu) LM\}$ одной буквой N . Равенство (2.3) примет при этом следующий простой вид:

$$\Psi(r, \Omega) = \sum_N \langle r | N \rangle \langle N | \Omega \rangle. \quad (2.5)$$

Используя это выражение, а также учитывая ортонормированность функций $\langle r | (\lambda\mu) LM \rangle$ (кратко $\langle r | N \rangle$), запишем значение интеграла перекрытия производящих инвариантов $\Psi(r, \tilde{\Omega})$ и $\Psi(r, \Omega)$:

$$J \equiv \langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = \sum_{N'} \sum_N \langle \tilde{\Omega} | N' \rangle \delta_{N'N} \langle N | \Omega \rangle = \sum_N \langle \tilde{\Omega} | N \rangle \langle N | \Omega \rangle. \quad (2.6)$$

Отметим, что интеграл перекрытия J записывается в виде бинарной суммы образов ортонормированных функций $\langle r | (\lambda, \mu) LM \rangle$.

Преобразуем теперь левую и правую части соотношения (2.4) с учетом разложения (2.5):

$$\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \hat{F}(r) | \Psi(r, \Omega) \rangle = \sum_{N'} \sum_N F_{N'N} \langle \tilde{\Omega} | N' \rangle \langle N | \Omega \rangle, \quad (2.7)$$

где $F_{N'N}$ — матричные элементы оператора $\hat{F}(r)$ на состояниях $\langle r | (\lambda, \mu) LM \rangle$;

$$\begin{aligned}
\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \tilde{F}(\Omega) | \Psi(r, \Omega) \rangle &= \tilde{F}(\Omega) \langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = \tilde{F}(\Omega) \sum_{N'} \langle \tilde{\Omega} | N' \rangle \langle N' | \Omega \rangle = \\
&= \sum_{N'} \langle \tilde{\Omega} | N' \rangle \langle N' | \tilde{F}(\Omega) | \Omega \rangle = \sum_{N'} \sum_N \tilde{F}_{N'N} \langle \tilde{\Omega} | N' \rangle \langle N | \Omega \rangle.
\end{aligned} \quad (2.8)$$

В равенстве (2.8) $\tilde{F}_{N'N}$ представляют собой коэффициенты разложения результата действия оператора $\tilde{F}(\Omega)$ на $\langle N' | \Omega \rangle$ по функциям $\langle N | \Omega \rangle$:

$$\tilde{F}(\Omega) \langle N' | \Omega \rangle = \sum_N \tilde{F}_{N'N} \langle N | \Omega \rangle. \quad (2.9)$$

Из равенств (2.7) и (2.8), с учетом (2.4), следует

$$F_{NN} = \tilde{F}_{NN}. \quad (2.10)$$

На основе полученных соотношений перечислим теперь схематически последовательность действий для построения искоемых функций и, при необходимости, сделаем соответствующие комментарии.

1. Рассматривая координаты векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ в качестве генераторных параметров, построим оператор Казимира второго порядка группы $SU(3)$ протон-нейтронной системы. Так как динамическими переменными модели являются величины t, α, β, γ , то и оператор Казимира должен выражаться через эти переменные.

2. Так как квантовые числа L и M являются интегралами движения, то собственные функции оператора Казимира будем искать в виде произведения функции, зависящей от переменной $t = \cos \theta$, и D -функции Вигнера: $\langle (\lambda, \mu) KLM | \Omega \rangle = F(t) D_{KM}^L(\alpha, \beta, \gamma)$. Поскольку собственные значения оператора Казимира группы $SU(3)$ известны, то нахождение явного вида функций $F(t)$ сводится к решению вполне определенного дифференциального уравнения второго порядка. Нахождение собственных функций оператора Казимира и анализ их свойств будут рассмотрены ниже.

3. Искомые функции $\langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle$ получим в виде линейной комбинации функций $\langle (\lambda, \mu) KLM | \Omega \rangle$ суммированием по квантовому числу K . Коэффициенты линейной комбинации при этом находятся из дополнительного требования, чтобы искомая функция была собственной функцией оператора Баргмана — Мошинского. Следовательно, этот оператор также необходимо построить в переменных t, α, β, γ .

Отметим, однако, что нормировка найденной таким образом функции остается неопределенной. Более того, само понятие нормированной функции в рассматриваемом случае требует уточнения, поскольку не опре-

делено понятие скалярного произведения функций, зависящих от переменных α, β, γ, t .

Функции $\langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle$ будем считать правильно нормированными (или просто «нормированными»), если матричные элементы преобразованных операторов $\tilde{F}_\Lambda(\Omega)$ на этих функциях совпадают с матричными элементами операторов $F(r)$ на соответствующих функциях-оригиналах $\langle r | (\lambda \mu) LM \rangle$, нормированных на единицу. Под матричными элементами преобразованных операторов в данном определении следует понимать коэффициенты разложения F_{NN} в соотношении (2.9). Таким образом, в основу понятия нормировки волновых функций, зависящих от коллективных переменных α, β, γ, t , положено равенство (2.10). Отсюда следует, что для получения нормированных функций нужно вычислить интеграл перекрытия производящих функций и представить его в виде бинарной линейной комбинации (2.6). Функции $\langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle$ в этом разложении получаются автоматически нормированными. Заметим, что при умножении одновременно всех функций $\langle (\lambda, \mu) LM | \Omega \rangle$ на один и тот же числовой множитель значения матричных элементов F_{NN} не изменяются (см. равенство (2.8)). Это означает, что числовой множитель, с которым записывается производящая функция, не имеет принципиального значения.

Рассмотрим теперь процедуру вычисления интеграла перекрытия $\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle$. Сформулируем ряд утверждений, которые не требуют доказательств вследствие своей очевидности.

1. Интеграл перекрытия $\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle$ для системы из A нуклонов можно представить с точностью до постоянного множителя в виде определителя матрицы $A \times A$. Элементами этой матрицы являются интегралы перекрытия (скалярные произведения) одночастичных функций вида (2.1) или (2.2).

2. Интегралы перекрытия двух одночастичных функций с разными спин-изоспиновыми квантовыми числами равны нулю.

3. Интегралы перекрытия двух одночастичных функций, относящихся к разным оболочкам, равны нулю.

4. Интегралы перекрытия одночастичных функций из одной и той же оболочки, вообще говоря, не равны нулю.

5. Интеграл перекрытия $\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle$ можно представить в виде произведения аналогичных интегралов перекрытия для отдельных оболочек, причем сомножители этого произведения, относящиеся к замкнутым оболочкам, являются константами.

6. Для всякой отдельно взятой оболочки интеграл перекрытия распадается на сомножители, каждый из которых характеризуется определенным значением спин-изоспинового состояния нуклона.

Пусть задана некоторая конфигурация системы нуклонов. Для вычисления интеграла перекрытия $\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle$ нужно последовательно выполнить следующие действия:

а) Выделить одночастичные состояния, относящиеся к отдельным незаполненным оболочкам (в конкретных примерах, приведенных выше, в каждом ядре имеется одна незаполненная оболочка).

б) В каждой незаполненной оболочке выделить группы одночастичных функций с одинаковой спин-изоспиновой частью.

в) Для каждой группы составить определители из интегралов перекрытия соответствующих одночастичных функций.

г) Перемножить полученные таким путем определители.

В порядке иллюстрации вычислим интеграл перекрытия $\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle$ для конфигураций нуклонов в ядрах ${}^8_4\text{Be}$, ${}^{20}_{10}\text{Ne}$, ${}^{44}_{22}\text{Ti}$. Все четыре одночастичные функции внешней оболочки в каждом из этих ядер отличаются друг от друга спин-изоспиновыми квантовыми числами. Координатные части этих функций имеют следующий вид (см. (2.1) и (2.2)) (в дальнейшем в тексте векторы $\mathbf{u}_2$, $\mathbf{u}_3$, $\mathbf{v}_2$, $\mathbf{v}_3$ не встречаются, поэтому для упрощения вместо $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{v}_1$ будем писать $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$):

$$\Psi_{q_1,0,0}^{(1)}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2^{q_1} q_1! \pi^{3/2}}} H_{q_1}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}) e^{-r^2/2}, \quad (2.1')$$

$$\Psi_{q_1,0,0}^{(2)}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2^{q_1} q_1! \pi^{3/2}}} H_{q_1}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) e^{-r^2/2}, \quad (2.2')$$

где $q_1 = 1$ для ядра ${}^8_4\text{Be}$, $q_1 = 2$ для ${}^{20}_{10}\text{Ne}$ и $q_1 = 3$ для ${}^{44}_{22}\text{Ti}$. Приняв во внимание рекомендации, сформулированные выше, искомый интеграл перекрытия можно записать в следующем виде:

$$\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = [\langle \tilde{\Psi}_{q_1,0,0}^{(1)} | \Psi_{q_1,0,0}^{(1)} \rangle]^2 [\langle \tilde{\Psi}_{q_1,0,0}^{(2)} | \Psi_{q_1,0,0}^{(2)} \rangle]^2, \quad (2.11)$$

где $\tilde{\Psi}_{q,0,0}^{(1)}$ и $\tilde{\Psi}_{q,0,0}^{(2)}$ получаются из соответствующих функций $\Psi^{(1)}$ и $\Psi^{(2)}$ заменой u на $\tilde{u}$ и v на $\tilde{v}$. Найдем значение интеграла перекрытия одночастичных функций

$$\langle \tilde{\Psi}_{q_1,0,0}^{(1)} | \Psi_{q_1,0,0}^{(1)} \rangle = \frac{1}{2^{q_1} q_1! \pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{q_1}(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) H_{q_1}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}) e^{-(x^2+y^2+z^2)} dx dy dz =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2^{q_1} q_1! \pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{q_1}((\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})x + \dots) e^{-(x^2 + y^2 + z^2)} dx dy dz = \\
&= \frac{1}{2^{q_1} q_1! \pi^{3/2}} (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{q_1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{q_1}(x) H_{q_1}(x) e^{-x^2} dx = (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{q_1}.
\end{aligned}$$

Отметим, что вычисления интеграла удобно проводить в системе координат, ось x которой направлена вдоль вектора $\tilde{\mathbf{u}}_1$. По аналогии запишем интеграл перекрытия функций $\tilde{\Psi}_{q_1,0,0}^{(2)}$ и $\Psi_{q_1,0,0}^{(2)}$:

$$\langle \tilde{\Psi}_{q_1,0,0}^{(2)} | \Psi_{q_1,0,0}^{(2)} \rangle = (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^{q_1}.$$

Подставив найденные значения интегралов перекрытия в (2.11), получим

$$\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{2q_1} \cdot (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^{2q_1}$$

или

$$\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = \begin{cases} (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2 (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^2 & \text{для } {}^8_4\text{Be} \\ (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^4 (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^4 & \text{для } {}^{20}_{10}\text{Ne} \\ (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^6 (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^6 & \text{для } {}^{44}_{22}\text{Ti}. \end{cases}$$

Отметим, что в модели двух аксиальных ротаторов в самом общем случае интеграл перекрытия имеет вид

$$\langle \Psi(r, \tilde{\Omega}) | \Psi(r, \Omega) \rangle = (\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{n_1} (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^{n_2}.$$

Таким образом, интеграл перекрытия является однородным полиномом степени n_1 по компонентам вектора $\mathbf{u}$ и степени n_2 по компонентам вектора $\mathbf{v}$.

3. ГЕНЕРАТОРЫ МОДЕЛИ $SU(3) \times SU(3)$

Как упоминалось выше, мы ограничиваемся случаем, когда индексы неприводимых представлений группы $SU(3)$ каждой из двух подсистем имеют вид: $(\lambda_n, \mu_n) = (n_1, 0)$; $(\lambda_p, \mu_p) = (n_2, 0)$. Каждое из этих неприводимых представлений можно реализовать на тензорных произведениях векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$:

$$\underbrace{\mathbf{u} \times \mathbf{u} \times \dots \times \mathbf{u}}_{n_1 \text{ раз}} \quad \text{для первой подсистемы,}$$

$$\underbrace{\mathbf{v} \times \mathbf{v} \times \dots \times \mathbf{v}}_{n_2 \text{ раз}} \quad \text{для второй подсистемы.}$$

Прямое произведение $(n_1, 0) \times (n_2, 0)$ содержит все неприводимые представления $SU(3)$, имеющие индексы симметрии:

$$(\lambda, \mu) = (n_1 + n_2 - 2m, m), \quad m = 0, 1, 2, \dots, n_2.$$

Пусть задана декартова система координат, которую в дальнейшем будем называть «лабораторной» или «неподвижной» системой. Шесть компонент $\{x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2\}$ векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ в этой системе примем в качестве исходных генераторных параметров и обычным образом свяжем с ними генераторы группы $SU(3)$ для каждой из двух подсистем. В дальнейшем наряду с декартовыми координатами векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ будут использоваться и их сферические компоненты: $\{u, \theta_1, \varphi_1; v, \theta_2, \varphi_2\}$.

Из декартовых и сферических генераторных параметров можно образовывать различные их комбинации, имеющие тот или иной смысл. Так, например, угол θ между векторами $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ связан с величинами $\theta_1, \theta_2, \varphi_2$ следующим равенством:

$$\cos \theta = \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos (\varphi_2 - \varphi_1) + \cos \theta_1 \cos \theta_2. \quad (3.1)$$

Построим при помощи векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$, следуя [1—3], «собственную» или «подвижную» прямоугольную систему координат с ортами

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2}{|\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2|}, \quad \mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1}{|\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1|}, \quad \mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2}{|\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2|},$$

где

$$\mathbf{n}_1 = \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|}, \quad \mathbf{n}_2 = \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}.$$

Компоненты векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ в собственной системе запишутся в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \{\xi_1, \xi_2, 0\}, \quad \mathbf{v} = \{\eta_1, \eta_2, 0\}, \\ \xi_1 &= u \cos \frac{\theta}{2}, \quad \eta_1 = v \cos \frac{\theta}{2}, \\ \xi_2 &= -u \sin \frac{\theta}{2}, \quad \eta_2 = v \sin \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Величины $\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2$, разумеется, можно выразить через сферические компоненты $u, \theta_1, \varphi_1, v, \theta_2, \varphi_2$, если использовать соотношение (3.1). Ориентацию подвижной (собственной) системы координат относительно лабораторной системы можно задать матрицей поворотов, элементы которой имеют смысл направляющих косинусов:

$$d_{11} = (\mathbf{i} \cdot \mathbf{e}_1) = \frac{1}{2 \cos \frac{\theta}{2}} (\sin \theta_1 \cos \varphi_1 + \sin \theta_2 \cos \varphi_2),$$

$$d_{21} = (\mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_1) = \frac{1}{2 \cos \frac{\theta}{2}} (\sin \theta_1 \sin \varphi_1 + \sin \theta_2 \sin \varphi_2),$$

$$d_{31} = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_1) = \frac{1}{2 \cos \frac{\theta}{2}} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2),$$

$$d_{12} = (\mathbf{i} \cdot \mathbf{e}_2) = \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}} (-\sin \theta_1 \cos \varphi_1 + \sin \theta_2 \cos \varphi_2),$$

$$d_{22} = (\mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_2) = \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}} (-\sin \theta_1 \sin \varphi_1 + \sin \theta_2 \sin \varphi_2),$$

$$d_{32} = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_2) = \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}} (-\cos \theta_1 + \cos \theta_2),$$

$$d_{13} = (\mathbf{i} \cdot \mathbf{e}_3) = \frac{1}{\sin \theta} (\sin \theta_1 \sin \varphi_1 \cos \theta_2 - \cos \theta_1 \sin \theta_2 \sin \varphi_2),$$

$$d_{23} = (\mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_3) = \frac{1}{\sin \theta} (\cos \theta_1 \sin \theta_2 \cos \varphi_2 - \sin \theta_1 \cos \varphi_1 \cos \theta_2),$$

$$d_{33} = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_3) = \frac{1}{\sin \theta} \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin (\varphi_2 - \varphi_1).$$

Приравнивая элементы матрицы поворотов, выраженные через $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$, соответствующим элементам, записанным через углы Эйлера α, β, γ [13] и учитывая соотношение (3.1), можно установить связь между переменными $\{\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2\}$, с одной стороны, и $\{\theta, \alpha, \beta, \gamma\}$ — с другой. Таким

образом, в дальнейшем мы будем использовать следующие эквивалентные совокупности независимых переменных:

$$\begin{Bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{Bmatrix} \leftrightarrow \begin{Bmatrix} u \\ \theta_1 \\ \phi_1 \\ v \\ \theta_2 \\ \phi_2 \end{Bmatrix} \leftrightarrow \begin{Bmatrix} u \\ v \\ \theta \\ \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{Bmatrix}. \quad (3.3)$$

В последнем столбце в (3.3) явным образом выделены динамические переменные θ , α , β , γ коллективных движений в ядрах в рамках рассматриваемой нами модели.

Одной из наших задач в данной работе является построение оператора Баргмана — Мошинского в переменных θ , α , β , γ . Для этого предварительно запишем генераторы группы $SU(3)$ во внутренней системе координат как для каждой из подсистем, так и для всей системы в целом. Выше (3.2) уже были записаны декартовы координаты ξ_i и η_i векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ во внутренней системе, и, следовательно, для построения генераторов группы необходимо теперь записать выражения для производных $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ и $\frac{\partial}{\partial \eta_i}$. Так как $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ являются компонентами оператора набла в подвижной системе координат, то их можно выразить через соответствующие компоненты $\frac{\partial}{\partial x_i^{(1)}} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_1} \frac{\partial}{\partial z_1} \right\}$ этого вектора в лабораторной системе при помощи матрицы поворотов:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_1} = \sum_i d_{1i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(1)}}; \quad \frac{\partial}{\partial \xi_2} = \sum_i d_{2i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(1)}}; \quad \frac{\partial}{\partial \xi_3} = \sum_i d_{3i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(1)}}. \quad (3.4)$$

Аналогично

$$\frac{\partial}{\partial \eta_1} = \sum_i d_{1i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(2)}}; \quad \frac{\partial}{\partial \eta_2} = \sum_i d_{2i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(2)}}; \quad \frac{\partial}{\partial \eta_3} = \sum_i d_{3i} \frac{\partial}{\partial x_i^{(2)}}. \quad (3.4')$$

Равенства (3.4) и (3.4') совместно с соотношением (3.2) позволяют выразить производные $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ и $\frac{\partial}{\partial \eta_i}$ в переменных u , v , θ , α , β , γ . Сделав необходимые выкладки, получим

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_1} &= \cos \frac{\theta}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{u} \sin \frac{\theta}{2} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\frac{\partial}{\partial \xi_2} &= -\sin \frac{\theta}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{u} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\frac{\partial}{\partial \xi_3} &= \frac{1}{2u} \left(-\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} M_1 + \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} M_2 \right), \\
\frac{\partial}{\partial \eta_1} &= \cos \frac{\theta}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial v} + \frac{1}{v} \sin \frac{\theta}{2} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\frac{\partial}{\partial \eta_2} &= \sin \frac{\theta}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial v} - \frac{1}{v} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\frac{\partial}{\partial \eta_3} &= \frac{1}{2v} \left(-\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} M_1 + \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} M_2 \right),
\end{aligned} \tag{3.4''}$$

где M_1, M_2, M_3 , с точностью до множителя i (мнимой единицы), есть операторы проекций момента всей системы на подвижные оси координат, и они определяются следующими равенствами:

$$\begin{aligned}
M_1 &= -\left(\xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_3} - \xi_3 \frac{\partial}{\partial \xi_2} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_3} - \eta_3 \frac{\partial}{\partial \eta_2} \right) = -\sin \gamma \cdot \frac{\partial}{\partial \beta}, \\
M_2 &= -\left(\xi_3 \frac{\partial}{\partial \xi_1} - \xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_3} + \eta_3 \frac{\partial}{\partial \eta_1} - \eta_1 \frac{\partial}{\partial \eta_3} \right) = -\cos \gamma \cdot \frac{\partial}{\partial \beta}, \\
M_3 &= -\left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \eta_1 \frac{\partial}{\partial \eta_2} - \eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_1} \right) = -\frac{\partial}{\partial \gamma}.
\end{aligned}$$

Запишем теперь все генераторы группы, связанные с вектором $\mathbf{u}$, в подвижной системе координат:

$$\begin{aligned}
\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} &= \cos^2 \frac{\theta}{2} \cdot u \frac{\partial}{\partial u} - \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} &= -\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot u \frac{\partial}{\partial u} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right), \\
\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_3} &= \frac{1}{2} M_2 + \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} M_1,
\end{aligned}$$

$$\xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} = -\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot u \frac{\partial}{\partial u} + \sin^2 \frac{\theta}{2} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right),$$

$$\xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \cdot u \frac{\partial}{\partial u} + \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} M_3 \right),$$

$$\xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_3} = \frac{1}{2} M_1 + \frac{1}{2} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \cdot M_2,$$

$$\xi_3 \frac{\partial}{\partial \xi_1} = \xi_3 \frac{\partial}{\partial \xi_2} = \xi_3 \frac{\partial}{\partial \xi_3} = 0.$$

Аналогично можно записать генераторы, связанные с вектором $\mathbf{v}$. Очевидно, что выражения для генераторов $\eta_i \frac{\partial}{\partial \eta_j}$ можно получить из $\xi_i \frac{\partial}{\partial \xi_j}$ формальной заменой $u \rightarrow v$, $\theta \rightarrow -\theta$.

4. ОПЕРАТОР КАЗИМИРА G_2

Оператор Казимира G_2 является квадратичной скалярной сверткой генераторов $A_{ij} = u_i \frac{\partial}{\partial u_j} + v_i \frac{\partial}{\partial v_j}$ группы $SU(3)$ (либо группы $U(3)$): $G_2 = A_{ij} A_{ji}$.

Наша ближайшая задача состоит в том, чтобы преобразовать оператор Казимира от декартовых компонент $\{u_i, v_i\}$ векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ к динамическим переменным $\{\theta, \alpha, \beta, \gamma\}$. Для этого сделаем некоторые предварительные преобразования:

$$\begin{aligned} G_2 &= \left(u_i \frac{\partial}{\partial u_j} + v_i \frac{\partial}{\partial v_j} \right) \left(u_j \frac{\partial}{\partial u_i} + v_j \frac{\partial}{\partial v_i} \right) = \\ &= u_i \frac{\partial}{\partial u_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} + u_i \frac{\partial}{\partial u_j} v_j \frac{\partial}{\partial v_i} + v_i \frac{\partial}{\partial v_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} + v_i \frac{\partial}{\partial v_j} v_j \frac{\partial}{\partial v_i}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Простой коммутацией операторов первое слагаемое в правой части равенства (4.1) можно преобразовать следующим образом:

$$u_i \frac{\partial}{\partial u_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} = \left(u_i \frac{\partial}{\partial u_i} \right)^2 + 2u_i \frac{\partial}{\partial u_i} = \left(u \frac{\partial}{\partial u} \right)^2 + 2u \frac{\partial}{\partial u}. \quad (4.2)$$

Напомним, что в рассматриваемой задаче все операторы (включая оператор G_2) определены в пространстве однородных полиномов степени $n_1 + n_2$ по компонентам векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$, где n_1 — сумма показателей сте-

пений компонент вектора $\mathbf{u}$, n_2 — то же самое для вектора $\mathbf{v}$. Такие полиномы являются собственными функциями операторов $u_j \frac{\partial}{\partial u_i} \equiv u \frac{\partial}{\partial u}$ и $v_i \frac{\partial}{\partial v_j} \equiv v \frac{\partial}{\partial v}$ с собственными значениями n_1 и n_2 соответственно. Следовательно, в (4.1) оператор (4.2) можно заменить его собственным значением:

$$u_i \frac{\partial}{\partial u_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} = n_1(n_1 + 2),$$

и аналогично

$$v_i \frac{\partial}{\partial v_j} v_j \frac{\partial}{\partial v_i} = n_2(n_2 + 2).$$

Далее,

$$u_i \frac{\partial}{\partial u_j} v_j \frac{\partial}{\partial v_i} = u_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left(\frac{\partial}{\partial v_i} v_j - \delta_{ij} \right) = u_i \frac{\partial}{\partial v_i} v_j \frac{\partial}{\partial u_j} - u_i \frac{\partial}{\partial u_i} = (\mathbf{u} \cdot \nabla^v)(\mathbf{v} \cdot \nabla^u) - n_1.$$

Выполнив аналогичные преобразования в следующем слагаемом выражения (4.1), получим

$$v_i \frac{\partial}{\partial v_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} = (\mathbf{v} \cdot \nabla^u)(\mathbf{u} \cdot \nabla^v) - n_2.$$

Правую часть последнего равенства можно записать иначе:

$$v_i \frac{\partial}{\partial v_j} u_j \frac{\partial}{\partial u_i} = u_j v_i \frac{\partial}{\partial v_j} \frac{\partial}{\partial u_i} = u_j \left(\frac{\partial}{\partial v_j} v_i - \delta_{ij} \right) \frac{\partial}{\partial u_i} = (\mathbf{u} \cdot \nabla^v)(\mathbf{v} \cdot \nabla^u) - n_1.$$

Следовательно, в рассматриваемом пространстве функций коммутатор операторов $(\mathbf{u} \cdot \nabla^v)$ и $(\mathbf{v} \cdot \nabla^u)$ равен просто разности чисел n_1 и n_2 :

$$[(\mathbf{u} \cdot \nabla^v), (\mathbf{v} \cdot \nabla^u)] = n_1 - n_2. \quad (4.3)$$

Таким образом, оператор Казимира можно представить одним из следующих выражений:

$$G_2 = 2(\mathbf{u} \cdot \nabla^v)(\mathbf{v} \cdot \nabla^u) + n_1^2 + n_2(n_2 + 1),$$

$$G_2 = 2(\mathbf{v} \cdot \nabla^u)(\mathbf{u} \cdot \nabla^v) + n_2^2 + n_1(n_1 + 1), \quad (4.4)$$

$$G_2 = (\mathbf{u} \cdot \nabla^v)(\mathbf{v} \cdot \nabla^u) + (\mathbf{v} \cdot \nabla^u)(\mathbf{u} \cdot \nabla^v) + n_1(n_1 + 1) + n_2(n_2 + 1).$$

В дальнейшем будем использовать третью приведенную здесь форму оператора G_2 , симметричную относительно перестановки $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$.

Принимая во внимание соотношения [13]:

$$\nabla_u = \mathbf{n}_u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{i}{u} [\mathbf{n}_u \times \mathbf{l}_u]; \quad \nabla_v = \mathbf{n}_v \frac{\partial}{\partial v} - \frac{i}{v} [\mathbf{n}_v \times \mathbf{l}_v],$$

где $\mathbf{n}_u = \frac{\mathbf{u}}{u}$; $\mathbf{n}_v = \frac{\mathbf{v}}{v}$, а $\mathbf{l}_u$ и $\mathbf{l}_v$ — операторы орбитального углового момента, действующие на переменные u_i и v_i , преобразуем скалярные произведения $(\mathbf{u} \cdot \nabla_v)$ и $(\mathbf{v} \cdot \nabla_u)$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla_v) &= u(\mathbf{n}_u \cdot \mathbf{n}_v) \frac{\partial}{\partial v} - i \frac{u}{v} (\mathbf{n}_u \cdot [\mathbf{n}_v \times \mathbf{l}_v]) = tu \frac{\partial}{\partial v} - i \frac{u}{v} ([\mathbf{n}_u \times \mathbf{n}_v] \cdot \mathbf{l}_v) = \\ &= tu \frac{\partial}{\partial v} - i \frac{u}{v} \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)}, \end{aligned}$$

где $t = \cos \theta$, а $l_v^{(3)}$ обозначена проекция оператора углового момента $\mathbf{l}$ на третью ось подвижной (внутренней) системы координат.

Действуя аналогичным образом, получим

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla_u) = tv \frac{\partial}{\partial u} + i \frac{v}{u} \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla_v)(\mathbf{v} \cdot \nabla_u) &= \left[tu \frac{\partial}{\partial v} - i \frac{u}{v} \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)} \right] \left[tv \frac{\partial}{\partial u} + i \frac{v}{u} \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)} \right] = \\ &= n_1(n_2+1)t^2 - in_1 \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)} t + i(n_2+1)t \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)} + \\ &\quad + \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)} \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)}; \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{v} \cdot \nabla_u)(\mathbf{u} \cdot \nabla_v) &= n_2(n_1+1)t^2 - i(n_1+1)t \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)} + in_2 \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)} t + \\ &\quad + \sqrt{1-t^2} l_u^{(3)} \sqrt{1-t^2} l_v^{(3)}. \end{aligned}$$

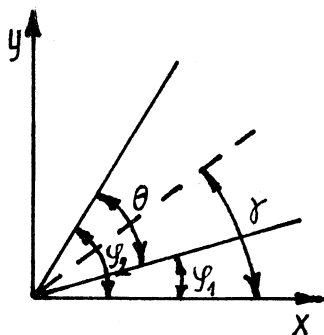
Получим теперь явный вид операторов $l_u^{(3)}$ и $l_v^{(3)}$.

Очевидно, эти операторы можно представить в виде

$$l_u^{(3)} = \frac{1}{2} L_3 + \tilde{l}_u^{(3)}; \quad l_v^{(3)} = \frac{1}{2} L_3 + \tilde{l}_v^{(3)},$$

где L_3 — проекция полного момента на третью ось внутренней системы координат, а $\tilde{l}_u^{(3)}$ и $\tilde{l}_v^{(3)}$ — проекции на ту же ось моментов «внутреннего» движения подсистем.

Связь между степенями свободы φ_1 и φ_2 двух подсистем с переменными θ , φ , характеризующими положение всей системы в целом



Так как в рассматриваемой модели имеется только одна степень свободы — θ внутреннего движения, то, очевидно,

$$l_u^{(3)} = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} + c \frac{\partial}{\partial \theta} \right); \quad l_v^{(3)} = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} - c \frac{\partial}{\partial \theta} \right),$$

где c — некоторая константа. Значение этой константы можно найти, рассмотрев связь между степенями свободы φ_1 и φ_2 подсистем и переменными θ и γ в простом случае движения относительно фиксированной оси (см. рисунок):

$$\left. \begin{aligned} \varphi_1 &= \gamma - \frac{\theta}{2} \\ \varphi_2 &= \gamma + \frac{\theta}{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{2} (\varphi_1 + \varphi_2) \\ \theta &= \varphi_2 - \varphi_1. \end{aligned}$$

$$l_u^{(3)} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi_1} = -i \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi_1} \right) = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right),$$

$$l_v^{(3)} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi_2} = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} + \frac{\partial}{\partial \theta} \right).$$

Таким образом, из последнего равенства следует, что константа $c = -1$.

Учитывая, что $\frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial (\cos \theta)} = -\sqrt{1-t^2} \frac{\partial}{\partial t}$, окончательно получим

$$l_u^{(3)} = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} + \sqrt{1-t^2} \frac{\partial}{\partial t} \right); \quad l_v^{(3)} = -i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \sqrt{1-t^2} \frac{\partial}{\partial t} \right). \quad (4.6)$$

Подставив (4.6) в (4.5), запишем искомое выражение для оператора Казимира G_2 :

$$G_2 = 2(1-t^2)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2(n_1 + n_2 - 1)t(1-t^2) \frac{\partial}{\partial t} + (n_2 - n_1)t\sqrt{1-t^2} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \\ - \frac{1}{2}(1-t^2) \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - 2n_1n_2(1-t^2) + (n_1 + n_2)^2 + 2(n_1 + n_2). \quad (4.7)$$

5. СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ ОПЕРАТОРА КАЗИМИРА G_2

Рассмотрим задачу нахождения функции $\varphi(t, \alpha, \beta, \gamma)$, которая зависит от всех четырех динамических переменных модели и является собственной функцией как оператора квадрата углового момента и его проекций на внешнюю и внутреннюю оси, так и оператора Казимира G_2 . Будем искать решение этой задачи в виде

$$\varphi(t, \alpha, \beta, \gamma) = y(t) D_{KM}^L(\alpha, \beta, \gamma).$$

Независимо от выбора $y(t)$ функция $\varphi(t, \alpha, \beta, \gamma)$ характеризуется квантовыми числами K, L, M . Для того чтобы эти функции преобразовывались по неприводимому представлению группы $SU(3)$, необходимо, чтобы они были собственными функциями оператора Казимира G_2 . Собственные значения g_2 оператора G_2 известны и просто выражаются через индексы (λ, μ) неприводимых представлений группы $SU(3)$ (либо группы $U(3)$) [15]:

$$g_2 = \lambda^2 + 2\lambda\mu + 2\mu^2 + 2\lambda + 2\mu.$$

В рассматриваемой нами модели $\lambda = n_1 + n_2 - 2m$, $\mu = m$, следовательно,

$$g_2 = (n_1 + n_2)^2 - 2(m-1)(n_1 + n_2 - m).$$

Заметим, что D -функции Вигнера являются собственными функциями операторов $\frac{\partial}{\partial \gamma}$ и $\frac{\partial^2}{\partial \gamma^2}$, входящих в G_2 , поскольку зависимость D -функций от переменной γ определяется множителем $e^{iK\gamma}$. Таким образом, задача нахождения собственных функций оператора Казимира сводится к решению обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка:

$$(1-t^2)^2 \frac{d^2 y}{dt^2} + (n_1 + n_2 - 1)t(1-t^2) \frac{dy}{dt} + \\ + \left[\left(\frac{1}{4}K^2 - n_1n_2 \right) (1-t^2) - i \frac{1}{2}K(n_1 - n_2)t\sqrt{1-t^2} + m(n_1 + n_2 - m + 1) \right] y(t) = 0. \quad (5.1)$$

Рассмотрим свойства симметрии уравнения (5.1). Отметим, во-первых, что при значении $K=0$ оно не изменяется при перестановке местами параметров n_1 и n_2 . В общем же случае $K \neq 0$ это уравнение является комплексным, и оно инвариантно относительно одновременного применения любой пары из следующих трех операций: перестановки $n_1 \leftrightarrow n_2$; замены $K \rightarrow -K$; операции комплексного сопряжения.

Сделаем в (5.1) подстановку

$$y(t) = (1 - t^2)^{m/2} u(t), \quad (5.2)$$

запишем уравнение относительно новой искомой функции $u(t)$:

$$(1 - t^2) \frac{d^2 u}{dt^2} + (N_1 + N_2 - 1) t \frac{du}{dt} + \left[\frac{1}{4} K^2 - N_1 N_2 - i \frac{1}{2} K (N_1 - N_2) \frac{t}{\sqrt{1 - t^2}} \right] u(t) = 0, \quad (5.3)$$

где $N_1 = n_1 - m$, $N_2 = n_2 - m$.

Все соображения, высказанные выше по поводу симметрии уравнения (5.1), справедливы и для уравнения (5.3), если по отношению к нему вместо перестановки $n_1 \leftrightarrow n_2$ использовать операцию $N_1 \leftrightarrow N_2$.

Перепишем последнее уравнение, заменив в нем N_1 и N_2 на целочисленные параметры $\lambda = N_1 + N_2 = n_1 + n_2 - 2m$ и $q = N_1 - N_2 = n_1 - n_2$:

$$(1 - t^2) \frac{d^2 u}{dt^2} + (\lambda - 1) t \frac{du}{dt} + \frac{1}{4} \left[K^2 + q^2 - \lambda^2 - i 2 K q \frac{t}{\sqrt{1 - t^2}} \right] u(t) = 0. \quad (5.3')$$

Непосредственно из полученного уравнения следует его инвариантность относительно перестановки местами параметров K и q .

Рассмотрим вначале решение уравнения (5.3) в некоторых частных случаях.

Решение уравнения (5.3) при ($n_1 = n_2$). Пусть $N_1 = N_2 = N$ (или, что то же самое, $n_1 = n_2 = n$). Тогда после введения новой независимой переменной $x = t^2$ и замены $K = 2l$ получим

$$x(1 - x) \frac{d^2 u}{dx^2} + \left[\frac{1}{2} - (1 - N) x \right] \frac{du}{dx} - \frac{N^2 - l^2}{4} u(x) = 0. \quad (5.4)$$

Очевидно, (5.4) представляет собой гипергеометрическое уравнение, каноническая форма которого обычно записывается в виде

$$x(1-x) \frac{d^2 u}{dx^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x] \frac{du}{dx} - \alpha\beta u = 0. \quad (5.5)$$

Если γ не равно целому числу, то в качестве двух линейно независимых решений уравнений (5.5) можно выбрать функции

$$u_1(x) = F(\alpha, \beta, \gamma, x), \quad u_2(x) = x^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma, x),$$

где $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ — гипергеометрическая функция.

Сопоставляя коэффициенты уравнений (5.4) и (5.5), определим значения параметров α, β, γ в (5.4):

$$\alpha = -\frac{N-l}{2} = -\frac{n-m-l}{2}, \quad \beta = -\frac{N+l}{2} = -\frac{n-m+l}{2}, \quad \gamma = \frac{1}{2}.$$

Следовательно, линейно независимыми решениями уравнения (5.4) являются функции

$$u_1(t) = F\left(-\frac{n-m-l}{2}, -\frac{n-m+l}{2}, \frac{1}{2}, t^2\right),$$

$$u_2(t) = tF\left(-\frac{n-m-l-1}{2}, -\frac{n-m+l-1}{2}, \frac{3}{2}, t^2\right).$$

В рассматриваемой модели интерес представляют только те из решений, которые являются полиномами конечной степени по t , причем l должно изменяться в следующих пределах:

- $(n-m) \leq l \leq n-m$, если l — целое число той же четности, что и $n-m$,
- $(n-m-1) \leq l \leq n-m-1$, если четность l отличается от четности $n-m$.

Таким образом, искомыми решениями уравнения (5.1), с учетом множителя $(1-t^2)^{m/2}$, выделенного в (5.2), являются следующие функции:

$$y(t) = \psi_l^{n,m}(t) =$$

$$= \begin{cases} (1-t^2)^{m/2} F\left(-\frac{n-m-l}{2}, -\frac{n-m+l}{2}, \frac{1}{2}, t^2\right), & \text{если } n-m-l \text{ четное,} \\ (1-t^2)^{m/2} tF\left(-\frac{n-m-l-1}{2}, -\frac{n-m+l-1}{2}, \frac{3}{2}, t^2\right), & \text{если } n-m-l \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (5.6)$$

Заметим, что вследствие симметрии гипергеометрической функции $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ относительно перестановки $\alpha \leftrightarrow \beta$ функция $\psi_l^{n,m}(t)$ не изменится при замене $l \rightarrow -l$.

Перепишем теперь (5.6), перейдя от величин n, m, l к стандартным индексам (λ, μ) , характеризующим $SU(3)$ -симметрию, и параметру $K = 2l$:

$$\begin{aligned} \psi_k^{\lambda, \mu}(t) = \\ = \begin{cases} (1-t^2)^{\mu/2} F\left(-\frac{\lambda-K}{4}, -\frac{\lambda+K}{4}, \frac{1}{2}; t^2\right), & \text{если } \frac{\lambda-K}{2} \text{ четное,} \\ (1-t^2)^{\mu/2} F\left(-\frac{\lambda-K-2}{4}, -\frac{\lambda-K+2}{4}, \frac{3}{2}; t^2\right), & \text{если } \frac{\lambda-K}{2} \text{ нечетное.} \end{cases} \end{aligned}$$

При фиксированных значениях индексов (λ, μ) совокупность функций $\psi_K^{\lambda, \mu}(t)$ с различными допустимыми значениями K можно рассматривать в качестве мультиплета с заданной $SU(3)$ -симметрией. Величина K , принимая только четные значения ($K = 2l$), изменяется в пределах $-\lambda \leq K \leq \lambda$. Таким образом, при заданном λ имеется $\lambda + 1$ функций. Отметим, однако, что в рассматриваемом случае $n_1 = n_2 = n$ функции $\psi_K^{\lambda, \mu}$ совпадают с $\psi_{-K}^{\lambda, \mu}$. Следовательно, имеется всего $\frac{\lambda}{2} + 1$ различных функций. Инвариантность функций $\psi_K^{\lambda, \mu}(t)$ относительно замены $K \rightarrow -K$ непосредственно следует из инвариантности уравнения (5.4) относительно замены $l \rightarrow -l$ и из того факта, что это уравнение при заданном N и l (или, что то же самое, при заданных λ и K) имеет единственное полиномиальное решение. В общем случае $n_1 \neq n_2$ функции $\psi_K^{\lambda, \mu}$ и $\psi_{-K}^{\lambda, \mu}$ не совпадают, в чем мы убедимся ниже.

Решение уравнения (5.3) при $n_1 \neq n_2$ и $K = 0, K = \pm 1$. При $n_1 \neq n_2$ параметр $\lambda = n_1 + n_2 - 2m = N_1 + N_2$ принимает четные значения, если числа n_1 и n_2 (или, что то же самое, N_1 и N_2) одинаковой четности. В этом случае K , изменяясь в пределах $-\lambda \leq K \leq \lambda$, принимает четные значения. При $K = 0$ уравнение (5.3) заменой $t^2 = x$ сводится к гипергеометрическому уравнению (5.5) с параметрами $\alpha = -\frac{N_1}{2}$, $\beta = -\frac{N_2}{2}$, $\gamma = \frac{1}{2}$. Следовательно, двумя линейно независимыми решениями этого уравнения будут функции

$$\begin{aligned} u_1(t) &= F\left(-\frac{N_1}{2}, -\frac{N_2}{2}, \frac{1}{2}; t^2\right), \\ u_2(t) &= t F\left(-\frac{N_1-1}{2}, -\frac{N_2-1}{2}, \frac{3}{2}; t^2\right), \end{aligned}$$

где, как и выше, через $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ обозначена гипергеометрическая функция. Отбирая из двух полученных решений лишь функции, являющиеся конечными полиномами по переменной t , запишем вид функций $y(t)$:

$$y(t) = \begin{cases} (1-t^2)^{m/2} F\left(-\frac{n_1-m}{2}, -\frac{n_2-m}{2}, \frac{1}{2}; t^2\right), & \text{если } n_1-m \text{ и } n_2-m \text{ четные,} \\ (1-t^2)^{m/2} t F\left(-\frac{n-m-1}{2}, \frac{n-m-1}{2}, \frac{3}{2}; t^2\right), & \text{если } n_1-m \text{ и } n_2-m \text{ нечетные.} \end{cases}$$

Перепишем эту функцию, используя вместо n_1, n_2, m параметры λ, μ и q :

$$y(t) = \psi_q^{\lambda, \mu}(t) = \begin{cases} (1-t^2)^{\mu/2} F\left(-\frac{\lambda+q}{4}, -\frac{\lambda-q}{4}, \frac{1}{2}; t^2\right), & \text{если } \frac{\lambda+q}{2} \text{ четные,} \\ (1-t^2)^{\mu/2} t F\left(-\frac{\lambda+q-2}{2}, -\frac{\lambda-q-2}{2}, \frac{3}{2}; t^2\right), & \text{если } \frac{\lambda+q}{2} \text{ нечетные.} \end{cases}$$

При фиксированных значениях n_1 и n_2 параметр q также остается неизменным (в частности, при $n_1 = n_2 = n, q = 0$), в то время как λ может принимать значения

$$\lambda = n_1 + n_2; n_1 + n_2 - 2; \dots; 1 \text{ или } 0.$$

Совокупность функций $\psi_q^{\lambda, \mu}$ при фиксированном значении параметров (λ, μ) , но с различными значениями q , можно рассматривать как мультиплет с определенной $SU(3)$ -симметрией. Параметр q принимает значения: $q = \lambda; \lambda - 2; \dots; -\lambda + 2; -\lambda$ — всего $\lambda + 1$ значений, при этом функции $\psi_q^{\lambda, \mu}$ совпадают с $\psi_{-q}^{\lambda, \mu}$. Напомним, что сейчас мы рассматриваем случай, когда $K = 0$.

Обратим внимание еще на то обстоятельство, что $\psi_q^{\lambda, \mu}$ получаются из аналогичных функций $\psi_K^{\lambda, \mu}$ формальным переобозначением $K \rightarrow q$. Это связано с тем, что уравнение (5.3') в рассмотренных двух частных случаях имеет один и тот же вид, с точностью до замены K на q .

Наконец, запишем решение уравнения (5.3) еще для одного частного случая, когда N_1 и N_2 — числа разной четности и при этом $K = 1$. Непосред-

ственной проверкой можно убедиться в том, что при $N_1 = n_1 - m$ четном и $N_2 = n_2 - m$ нечетном уравнению (5.3) удовлетворяет следующая функция:

$$y(t) = (1 - t^2)^{m/2} \left\{ F \left(-\frac{N_1}{2}, -\frac{N_2 - 1}{2}, \frac{1}{2}, t^2 \right) (\sqrt{1+t} + i\sqrt{1-t}) + \right. \\ \left. + N_1 t F \left(-\frac{N_1 - 2}{2}, -\frac{N_2 - 1}{2}, \frac{3}{2}, t^2 \right) (\sqrt{1+t} - i\sqrt{1-t}) \right\}.$$

6. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ (5.3) ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ K

Для нахождения решения уравнения (5.3) при произвольных допустимых значениях K сделаем в нем замену независимой переменной $t = \cos \theta$:

$$\frac{d^2 u}{d\theta^2} - (N_1 + N_2) \operatorname{ctg} \theta \frac{du}{d\theta} + \\ + \left[\frac{1}{4} K^2 - N_1 N_2 + i \frac{1}{2} K(N_1 - N_2) \operatorname{ctg} \theta \right] u = 0. \quad (6.1)$$

Преобразуем уравнение (6.1), заменив $u(\theta)$ новой функцией $w(\theta)$, определяемой равенством:

$$u(\theta) = w(\theta) e^{i\theta(N_1 - K/2)}. \quad (6.2)$$

После подстановки (6.2) в (6.1) получим

$$\frac{d^2 w}{d\theta^2} + \left[i(2N_1 - K) - (N_1 + N_2) \operatorname{ctg} \theta \right] \frac{dw}{d\theta} - \\ - \left\{ N_1(N_1 + N_2) - KN_1 + i \operatorname{ctg} \theta [N_1(N_1 + N_2) - KN_2] \right\} w = 0. \quad (6.3)$$

После введения новой независимой переменной $z = e^{-i2\theta}$ (6.3) принимает вид

$$z(1-z) \frac{d^2 w}{dz^2} + \frac{1}{2} \left[(2 + K - N_1 + N_2) + (3N_1 + N_2 - K - 2) z \right] \frac{dw}{dz} + \\ + \frac{1}{2} N_1(K - N_1 - N_2) w = 0. \quad (6.4)$$

Легко видеть, что (6.4) является гипергеометрическим уравнением, решение которого в виде полинома конечной степени по z можно записать в следующем виде:

$$w(z) = F\left(-N_1, -\frac{N_1 + N_2 - K}{2}, -\frac{N_1 - N_2 - K}{2} + 1; z\right). \quad (6.5)$$

Случай, когда параметр γ гипергеометрической функции $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ равен нулю либо целому отрицательному числу, является особым. Пусть $\gamma = 1 - s$, где s — натуральное число. Тогда решением гипергеометрического уравнения будет функция [14]:

$$w(z) = z^s F(\alpha + m, \beta + m, 1 + m; z).$$

Следовательно, в нашем случае

$$w(z) = z^{(N_1 - N_2 - K)/2} F\left(-N_2, -\frac{N_1 + N_2 + K}{2}, \frac{N_1 - N_2 - K}{2} + 1; z\right),$$

если $N_1 - N_2 - K > 0$.

Подставляя полученные выражения в (6.2) и возвращаясь к переменной θ , получим

$$u(\theta) = \begin{cases} F\left(-N_1, -\frac{N_1 + N_2 - K}{2}, -\frac{N_1 - N_2 - K}{2} + 1; e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_1 - K/2)}, \\ \text{если } N_1 - N_2 - K \leq 0, \\ F\left(-N_2, -\frac{N_1 + N_2 + K}{2}, -\frac{N_2 - N_1 + K}{2} + 1; e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_2 + K/2)}, \\ \text{если } N_1 - N_2 - K > 0. \end{cases} \quad (6.6)$$

Выражения в правой части (6.6) при помощи известных соотношений [14] можно преобразовать таким образом, чтобы при $\theta = 0$ гипергеометрические функции равнялись единице:

$$u(\theta) = \begin{cases} F\left(-N_1, -\frac{N_1 + N_2 - K}{2}, -N_1 - N_2; 1 - e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_1 - K/2)}, & (6.6a) \\ F\left(-N_2, -\frac{N_1 + N_2 + K}{2}, -N_1 - N_2; 1 - e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_2 + K/2)}. & (6.6b) \end{cases}$$

Несмотря на внешнее различие, выражения (6.6a) и (6.6b) представляют одну и ту же функцию, в чем можно легко убедиться, принимая во внимание известное тождество

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma; z).$$

Заметим, что если N_1 и N_2 — числа одинаковой (противоположной) четности, то параметр K в (6.6а), (6.6б) может принимать только четные (только нечетные) значения в пределах $-(N_1 + N_2) \leq K \leq N_1 + N_2$.

Возвращаясь к выражению (5.2), запишем теперь собственную функцию оператора Казимира с фиксированным значением K :

$$\psi_K = \sin^m \theta \begin{cases} F\left(-N_1, -\frac{N_1 + N_2 - K}{2}, -N_1 - N_2; 1 - e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_1 - K/2)}, \\ \text{или} \\ F\left(-N_2, -\frac{N_1 + N_2 + K}{2}, -N_1 - N_2; 1 - e^{-i2\theta}\right) e^{i\theta(N_2 + K/2)}. \end{cases} \quad (6.7)$$

7. ОПЕРАТОР БАРГМАНА — МОШИНСКОГО

Под оператором Баргмана — Мошинского (БМ) будем понимать скалярную свертку генераторов, определяемую равенством:

$$\Omega = L_i A_{ij} L_j, \quad (7.1)$$

где $\mathbf{L}$ — оператор полного момента, т.е. сумма моментов двух подсистем

$$\mathbf{L} = \mathbf{I}^u + \mathbf{I}^v, \quad \text{а} \quad A_{ij} = u_i \nabla_j^u + v_i \nabla_j^v, \quad (7.2)$$

где ∇ — оператор набла. В дальнейшем в определении оператора БМ будут сделаны некоторые уточнения для того, чтобы привести его в соответствие с аналогичным определением, используемым в книге [15].

Подставляя (7.2) в (7.1) и учитывая, что

$$(\mathbf{I}^u \cdot \mathbf{u}) \equiv 0, \quad (\mathbf{I}^v \cdot \mathbf{v}) \equiv 0, \quad (\nabla^u \cdot \mathbf{I}^u) \equiv 0 \quad \text{и} \quad (\nabla^v \cdot \mathbf{I}^v) \equiv 0, \quad (7.3)$$

получим $\Omega = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{I}^v) (\mathbf{I}^v \cdot \nabla^u) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{I}^u) (\mathbf{I}^u \cdot \nabla^v)$.

Принимая во внимание тождества (7.3), операторы $\mathbf{I}^u$ и $\mathbf{I}^v$ в правой части данного равенства можно заменить оператором полного момента $\mathbf{L}$:

$$\Omega = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{L}) (\mathbf{L} \cdot \nabla^u) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{L}) (\mathbf{L} \cdot \nabla^v). \quad (7.4)$$

Перепишем (7.4), сделав подстановку $\mathbf{L} = i\mathbf{M}$:

$$-\Omega = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{M}) (\mathbf{M} \cdot \nabla^u) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{M}) (\mathbf{M} \cdot \nabla^v). \quad (7.5)$$

Выразим скалярные произведения в последнем равенстве через компоненты векторов во внутренней системе координат:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{u} \cdot \mathbf{M}) &= u \cos \frac{\theta}{2} M_1 - u \sin \frac{\theta}{2} M_2, \\
(\mathbf{v} \cdot \mathbf{M}) &= v \cos \frac{\theta}{2} M_1 + v \sin \frac{\theta}{2} M_2, \\
(\mathbf{M} \cdot \nabla^u) &= M_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + M_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2} + M_3 \frac{\partial}{\partial \xi_3} + \delta, \\
(\mathbf{M} \cdot \nabla^v) &= M_1 \frac{\partial}{\partial \eta_1} + M_2 \frac{\partial}{\partial \eta_2} + M_3 \frac{\partial}{\partial \eta_3} + \delta.
\end{aligned} \tag{7.5'}$$

Наличие добавочных слагаемых δ в последних двух равенствах связано с тем, что операторы $\mathbf{M}$ не коммутируют с матрицами преобразования к внутренней системе координат. В промежуточных выкладках эти слагаемые пока опустим, их вклад будет учтен ниже при записи окончательного выражения для оператора БМ.

Подставим в (7.5') значения производных $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ и $\frac{\partial}{\partial \eta_i}$ в переменных $\{\alpha, \beta, \gamma, \theta, u, v\}$ (3.4'') и перепишем (7.5) в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\Omega = & - \left\{ (n_1 + n_2) \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} M_1^2 + \sin^2 \frac{\theta}{2} M_2^2 \right) + \right. \\
& + \frac{1}{2} (n_2 - n_1) \sin \theta (M_1 M_2 + M_2 M_1) + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (M_2^2 - M_1^2) + \\
& \left. + \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} M_2 M_1 M_3 - \cos^2 \frac{\theta}{2} M_1 M_2 M_3 \right) + M_1 M_3 M_2 - M_2 M_3 M_1 \right\}. \tag{7.6}
\end{aligned}$$

Вновь сделаем замену $\mathbf{M} = -i\mathbf{L}$, $\cos \theta = t$, и вместо операторов L_1, L_2, L_3 введем операторы $L_+ = L_1 + iL_2$, $L_- = L_1 - iL_2$, $L_0 = L_3$. Принимая во внимание известные коммутационные соотношения для проекций момента на внутренние оси: $[L_i, L_j] = -i\epsilon_{ijk} L_k$, получим

$$\begin{aligned}
\Omega = & (n_1 + n_2) \left[\frac{1}{4} t (L_+^2 + L_-^2) + \frac{1}{2} L^2 - L_0^2 \right] + \\
& + i \frac{1}{4} (n_1 - n_2) \sqrt{1 - t^2} (L_+^2 - L_-^2) + \frac{1}{2} (1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} (L_+^2 - L_-^2) + \\
& + \frac{1}{4} \left[t (L_+^2 - L_-^2) + 2L_0 \right] L_0 + L^2 - 2L_0^2 + \gamma. \tag{7.7}
\end{aligned}$$

В правой части последнего равенства γ представляет собой поправку, приводящую (7.7) в соответствие с оператором БМ в книге [15]. При непосредственном нахождении этой поправки нужно учесть, что в [15] след (шпур) генераторов A_{ij} равен нулю, и в операторе БМ несколько иначе, чем

в (2.1), записаны сомножители: $\Omega = A_{ij} L_i L_j$. Кроме того, нужно учесть поправку δ , упоминавшуюся выше.

Однако γ можно найти иначе (поскольку есть все основания считать, что она имеет простой вид), а именно подбором такого γ , при котором собственные значения оператора (7.8) при низжайших значениях L совпадают с соответствующими собственными значениями оператора БМ в [15].

Окончательное выражение оператора Баргмана — Мошинского представим в виде суммы трех операторов: $\Omega = R_+ + R_- + R_0$, где

$$\begin{aligned} R_+ &= \frac{1}{4} \left[(n_1 + n_2)t + i(n_1 - n_2) \sqrt{1 - t^2} + 2(1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right] L_+^2 + \frac{1}{4} t L_+^2 L_0, \\ R_- &= \frac{1}{4} \left[(n_1 + n_2)t - i(n_1 - n_2) \sqrt{1 - t^2} + 2(1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right] L_-^2 - \frac{1}{4} t L_-^2 L_0, \\ R_0 &= \left[\frac{1}{6} (n_1 + n_2) + \frac{1}{2} \right] L^2 - \frac{1}{2} (n_1 + n_2 + 3) L_0^2. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Базисные функции, на которых в дальнейшем будут вычисляться матричные элементы операторов, являются собственными функциями оператора Казимира и представляют собой произведения D -функций Вигнера и функции $\varphi_K(t)$, зависящие только от переменной t (см. (6.7)). Функции $\varphi_K(t) D_{MK}^L$ являются собственными функциями оператора R_0 :

$$R_0 \varphi_K(t) D_{MK}^L = \left\{ \left[\frac{1}{6} (n_1 + n_2) + \frac{1}{2} \right] L(L+1) - \frac{1}{2} (n_1 + n_2 + 3) K^2 \right\} \varphi_K(t) D_{MK}^L.$$

Операторы R_+ и R_- , при их действии на функции $\varphi_K(t) D_{MK}^L$, изменяют квантовое число K на две единицы:

$$\begin{aligned} R_+ \varphi_K(t) D_{MK}^L &= \text{const } \varphi_{K-2}(t) D_{MK-2}^L, \\ R_- \varphi_K(t) D_{MK}^L &= \text{const } \varphi_{K+2}(t) D_{MK+2}^L. \end{aligned} \quad (7.9)$$

8. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ОПЕРАТОРА БАРГМАНА — МОШИНСКОГО

Вычислим матричные элементы оператора Баргмана — Мошинского на функциях $\varphi_K(t) D_{MK}^L$. Учитывая, что D -функции являются собственными функциями оператора L_0 , операторы $R_{\pm}$ в (7.9) можно записать в факторизованном виде:

$$R_+ = \frac{1}{4} L_+^2 \tilde{R}_+, \quad R_- = \frac{1}{4} L_-^2 \tilde{R}_-,$$

где

$$\tilde{R}_+ = (n_1 + n_2 + K) t + i(n_2 - n_1) \sqrt{1 - t^2 + 2(1 - t^2)} \frac{\partial}{\partial t},$$

$$\tilde{R}_- = (n_1 + n_2 - K) t - i(n_2 - n_1) \sqrt{1 - t^2 + 2(1 - t^2)} \frac{\partial}{\partial t}$$

или

$$\tilde{R}_+ = (n_1 + n_2 + K) \cos \theta - \sin \theta \left[i(n_1 - n_2) + 2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right],$$

$$\tilde{R}_- = (n_1 + n_2 - K) \cos \theta + \sin \theta \left[i(n_1 - n_2) - 2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right].$$

В дальнейшем функции, зависящие только от переменной t и отвечающие определенному значению K , там, где это целесообразно, будем обозначать кратко $|K\rangle$, а D -функции — $|LK\rangle$.

Так как операторы $\tilde{R}_+$ и $\tilde{R}_-$ при действии на функции $|K\rangle$ изменяют значение параметра K на две единицы:

$$\tilde{R}_+ |K\rangle = c_1 |K - 2\rangle,$$

$$\tilde{R}_- |K\rangle = c_2 |K + 2\rangle, \quad (8.1)$$

то для каждого данного значения квантового числа L совокупность матричных элементов оператора БМ образует (при $L \leq \max\{\lambda, \mu\}$) трехдиагональную матрицу размерности $(L + 1) \times (L + 1)$, где на главной диагонали находятся матричные элементы оператора R_0 , а на двух побочных диагоналях — матричные элементы операторов R_+ и R_- . Очевидно при этом, что отличные от нуля матричные элементы последних двух операторов можно представить в факторизованном виде:

$$\langle R_+ \rangle = \frac{1}{4} \langle LK - 2 | L_+^2 | LK \rangle \langle K - 2 | \tilde{R}_+ | K \rangle,$$

$$\langle R_- \rangle = \frac{1}{4} \langle LK + 2 | L_-^2 | LK \rangle \langle K + 2 | \tilde{R}_- | K \rangle. \quad (8.2)$$

Вычисление матричных элементов операторов $\tilde{R}_+$ и $\tilde{R}_-$ сводится к определению коэффициентов c_1 и c_2 в соотношениях (8.1). Для нахождения последних достаточно сравнить первые члены разложения в ряд по степеням

θ в левой и правой частях равенств (8.1). Учитывая, что при малых значениях θ

$$\tilde{R}_+ = (n_1 + n_2 + K) - 2\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \dots,$$

$$\tilde{R}_- = (n_1 + n_2 - K) - 2\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \dots,$$

из (8.1) получим

$$\left[(n_1 + n_2 + K) - 2\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \theta^m = c_1 \theta^m,$$

$$\left[(n_1 + n_2 - K) - 2\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \theta^m = c_2 \theta^m.$$

Отсюда следует

$$\langle K - 2 | \tilde{R}_+ | K \rangle = n_1 + n_2 + K - 2m = N_1 + N_2 + K = \lambda + K,$$

$$\langle K + 2 | \tilde{R}_- | K \rangle = n_1 + n_2 - K - 2m = N_1 + N_2 - K = \lambda - K.$$

Принимая во внимание известные значения матричных элементов лестничных операторов $L_{\pm}$, запишем:

$$\langle LK - 2 | L_+^2 | LK \rangle = [(L + K)(L + K - 1)(L - K + 1)(L - K + 2)]^{1/2},$$

$$\langle LK + 2 | L_-^2 | LK \rangle = [(L - K)(L - K - 1)(L + K + 1)(L + K + 2)]^{1/2}.$$

Диагональные матричные элементы оператора БМ находятся просто, так как функции $\varphi_K(t) D_{MK}^L$ являются собственными функциями оператора R_0 . Запишем окончательные выражения для матричных элементов оператора Баргмана — Мошинского Ω :

$$\langle K' | \Omega | K \rangle =$$

$$= \begin{cases} \langle K + 2 | R_- | K \rangle = \frac{1}{4} (\lambda - K) [(L - K)(L - K - 1)(L + K + 1)(L + K + 2)]^{1/2} \\ \langle K | R_0 | K \rangle = \left[\frac{1}{6} (\lambda + 2\mu) + \frac{1}{2} \right] L(L + 1) - \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu + 3) K^2 \\ \langle K - 2 | R_+ | K \rangle = \frac{1}{4} (\lambda + K) [(L + K)(L + K - 1)(L - K + 1)(L - K + 2)]^{1/2}. \end{cases}$$

В качестве примера приведем табл.2 матричных элементов оператора Ω для нечетных значений λ и момента $L = 1$. В этом случае K может принимать значения 1 и -1 .

Таблица 2. Матричные элементы оператора Ω для момента $L = 1$

	$K = 1$	$K = -1$
$K' = 1$	$-\frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{3} (\lambda + 2\mu) \right]$	$\frac{1}{2} (\lambda + 1)$
$K' = -1$	$\frac{1}{2} (\lambda + 1)$	$-\frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{3} (\lambda + 2\mu) \right]$

Приведем также в табл. 3 матричные элементы оператора Ω для четных значений λ и момента $L = 2$. В этом случае K может принимать значения 2, 0 и -2 .

Таблица 3. Матричные элементы оператора Ω для момента $L = 2$ (λ четные)

	$K = 2$	$K = 0$	$K = -2$
$K' = 2$	$-(\lambda + 2\mu + 3)$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \lambda$	0
$K' = 0$	$\sqrt{\frac{3}{2}} (\lambda + 2)$	$\lambda + 2\mu + 3$	$\sqrt{\frac{3}{2}} (\lambda + 2)$
$K' = -2$	0	$\sqrt{\frac{3}{2}} \lambda$	$-(\lambda + 2\mu + 3)$

9. СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРА БАРГМАНА — МОШИНСКОГО

Процедуру нахождения собственных значений и собственных функций оператора БМ подробно рассмотрим на частном примере, когда $L = 2$, при $L \leq \max \{\lambda, \mu\}$. При четном λ собственную функцию оператора БМ следует искать в виде линейной суперпозиции функций со всеми допустимыми значениями числа K :

$$|\psi\rangle = C_0 |K=0\rangle D_{M0}^2 + C_2 |K=2\rangle D_{M2}^2 + C_{-2} |K=-2\rangle D_{M-2}^2, \quad (9.1)$$

при этом задача сводится к нахождению коэффициентов суперпозиции C_0, C_2, C_{-2} . Так как матричные элементы оператора БМ на функциях с

заданными значениями K найдены (см. табл.3), то собственные значения и собственные функции находятся обычным методом диагонализации матрицы.

Обозначим ω собственные значения оператора БМ и запишем секулярное уравнение для нахождения этих величин:

$$\begin{vmatrix} -(\lambda + \mu + 3) - \omega & \sqrt{\frac{3}{2}} \lambda & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{2}} (\lambda + 2) & (\lambda + 2\mu + 3) - \omega & \sqrt{\frac{3}{2}} (\lambda + 2) \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} \lambda & -(\lambda + \mu + 3) - \omega \end{vmatrix} = 0.$$

Алгебраическое уравнение третьей степени, представленное в виде определителя, факторизуется, и вследствие этого его корни находятся просто:

$$\omega_1 = -(\lambda + \mu + 3); \quad \omega_{2,3} = \pm \sqrt{(2\lambda + \mu + 3)^2 + 3\mu(\mu + 2)}.$$

Подставляя, как обычно, ω_i в систему однородных уравнений, находим искомые коэффициенты C_0, C_2, C_{-2} :

$$C_2 = C_{-2} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\lambda}{(\lambda + 2\mu) + \omega_i} C_0; \quad \omega_i = \omega_{2,3}.$$

В том случае, если $\omega_i = \omega_1 = -(\lambda + 2\mu + 3)$, то $C_0 = 0$ и $C_{-2} = -C_2$. В дальнейшем, если $C_0 = 0$ не равно нулю, то функции (9.1) будем нормировать так, чтобы $C = 1$. Таким образом, собственные функции оператора БМ имеют следующий вид:

$$|\psi\rangle_1 = |K=2\rangle D_{M2}^2 - |K=-2\rangle D_{M-2}^2,$$

$$|\psi\rangle_{2,3} = |K=0\rangle D_{M0}^2 + \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\lambda}{(\lambda + 2\mu) + \omega_{2,3}} [|K=2\rangle D_{M2}^2 + |K=-2\rangle D_{M-2}^2].$$

Перепишем выражение в правой части равенства через функции

$$D_{M2+}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (D_{M2}^2 + D_{M-2}^2) \quad \text{и} \quad D_{M2-}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (D_{M2}^2 - D_{M-2}^2):$$

$$|\psi\rangle_1 = |K_{2-}\rangle D_{M2+}^2 + |K_{2+}\rangle D_{M2-}^2,$$

$$|\psi_{2,3}\rangle = |K=0\rangle D_{M0}^2 + \sqrt{3} \frac{\lambda}{(\lambda + 2\mu + 3) + \omega_{2,3}} [|K_{2+}\rangle D_{M2+}^2 + |K_{2-}\rangle D_{M2-}^2].$$

В последнем равенстве введены следующие обозначения:

$$|K_{2+}\rangle = \frac{1}{2} (|K=2\rangle + |K=-2\rangle) \text{ и } |K_{2-}\rangle = \frac{1}{2} (|K=2\rangle - |K=-2\rangle).$$

При $\mu = 0$ и четных λ волновые функции имеют следующий вид:

$$|\psi\rangle_2 = |K=0\rangle D_{M0}^2 + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\lambda}{(\lambda+2)} [|K_{2+}\rangle D_{M2+}^2 + |K_{2-}\rangle D_{M2-}^2],$$

$$|\psi\rangle_3 = |K=0\rangle D_{M0}^2 - \sqrt{3} [|K_{2+}\rangle D_{M2+}^2 + |K_{2-}\rangle D_{M2-}^2].$$

Если λ нечетное (т.е. если n_1 и n_2 — числа противоположной четности), то совокупность матричных элементов оператора БМ для заданного четного значения момента L (это может быть только в том случае, если $\mu \neq 0$) образует матрицу размерности $L \times L$. При $L = 2$ величина K может принимать только два значения: $K = \pm 1$. В табл. 4 приведены матричные элементы.

Таблица. 4 Матричные элементы оператора Ω
для $L = 2$ (λ нечетные, $\mu \neq 0$)

	$K = 1$	$K = -1$
$K' = 1$	$\frac{1}{2} (\lambda + 2\mu + 3)$	$\frac{3}{2} (\lambda + 1)$
$K' = -1$	$\frac{3}{2} (\lambda + 1)$	$\frac{1}{2} (\lambda + 2\mu + 3)$

Решая секулярное уравнение, найдем собственные значения оператора Баргмана — Мошинского:

$$\omega_1 = 2\lambda + \mu + 3, \quad \omega_2 = -\lambda + \mu.$$

Соответствующие собственные функции оператора БМ в рассматриваемом случае имеют следующий вид:

$$|\psi\rangle_1 = |K=1\rangle D_{M1}^2 + |K=-1\rangle D_{M-1}^2 = \sqrt{2} (|K_{1+}\rangle D_{M1+}^2 + |K_{1-}\rangle D_{M1-}^2),$$

$$|\psi\rangle_2 = |K=1\rangle D_{M1}^2 - |K=-1\rangle D_{M-1}^2 = \sqrt{2} (|K_{1+}\rangle D_{M1-}^2 + |K_{1-}\rangle D_{M1+}^2). \quad (9.2)$$

Как видно из равенств (9.2), коэффициенты суперпозиции в рассматриваемом частном случае не зависят от λ и μ .

Функции $|K=0\rangle$, $|K_{2+}\rangle$, $|K_{2-}\rangle$, $|K_{1+}\rangle$ и $|K_{1-}\rangle$ для каждого конкретных значений N_1 , N_2 , m , K можно легко записать в явном виде, используя выражения (7.9). Приведем в табл.5 вид этих функций при нижайших зна-

чениях чисел N_1 и N_2 . Так как все функции $|K\rangle$ с $m \neq 0$ содержат один и тот же множитель $(1 - t^2)^{m/2}$, то для краткости этот множитель при записи функций будем опускать. Учтем, что при четных λ четность чисел N_1 и N_2 одинакова, при нечетных — различна, поскольку эти числа связаны равенством $\lambda = N_1 + N_2$.

Таблица 5. Функции $|K=0\rangle$, $|K_{2+}\rangle$, $|K_{2-}\rangle$, $|K_{1+}\rangle$ и $|K_{1-}\rangle$ для некоторых значений N_1 и N_2

	λ четное
N_1 четное $N_2 = 0$	$ K=0\rangle = 1$; $ K_{2+}\rangle = t$; $ K_{2-}\rangle = i\sqrt{1-t^2}$
$N_1 = 1$ $N_2 = 1$	$ K=0\rangle = t$ $ K_{2+}\rangle = 1$; $ K_{2-}\rangle = 0$
$N_1 = 2$ $N_2 = 2$	$ K=0\rangle = \frac{1}{3}(1+2t^2)$; $ K_{2+}\rangle = t$; $ K_{2-}\rangle = 0$
$N_1 = 4$ $N_2 = 2$	$ K=0\rangle = \frac{1}{5}(1+4t^2)$; $ K_{2+}\rangle = \frac{11}{15}t\left(1 + \frac{4}{11}t^2\right)$; $ K_{2-}\rangle = -i\frac{1}{15}(1+4t^2)\sqrt{1-t^2}$
$N_1 = 3$ $N_2 = 1$	$ K=0\rangle = t$ $ K_{2+}\rangle = \frac{1}{2}(1+t^2)$ $ K_{2-}\rangle = i\frac{1}{2}t\sqrt{1-t^2}$
$N_1 = 3$ $N_2 = 3$	$ K=0\rangle = \frac{3}{5}t\left(1 + \frac{2}{3}t^2\right)$ $ K_{2+}\rangle = \frac{1}{5}(1+4t^2)$ $ K_{2-}\rangle = 0$
	λ нечетное
N_1 нечетное $N_2 = 0$	$ K_{1+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1+t}$; $ K_{1-}\rangle = i\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1-t}$
$N_1 = 2$ $N_2 = 1$	$ K_{1+}\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}}(1+2t)\sqrt{1+t}$; $ K_{1-}\rangle = -i\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-2t)\sqrt{1-t}$;

Собственные значения и собственные функции оператора БМ для значений момента $L = 0, 1, 2$ и 3 приведены в табл.6.

Таблица 6. Собственные значения и собственные функции оператора Баргмана — Мошинского для значений момента $L = 0, 1, 2$ и 3

Момент	Собственные значения оператора БМ	Собственные функции оператора БМ
$L = 0$	$\omega = 0$	$ \Psi\rangle = K = 0\rangle$
$L = 1$	$\omega = 1 + \frac{1}{3}(\lambda + 2\mu)$	$ \Psi\rangle = K = 0\rangle D_{M0}^1$
	$\omega = -\left[1 + \frac{1}{3}(2\lambda + \mu)\right]$	$ \Psi\rangle = K_{1-}\rangle D_{M1+}^1 + K_{1+}\rangle D_{M1-}^1$
	$\omega = \frac{1}{3}(\lambda - \mu)$	$ \Psi\rangle = K_{1+}\rangle D_{M1+}^1 + K_{1-}\rangle D_{M1-}^1$
$L = 2$	$\omega = 2\lambda + \mu + 3$	$ \Psi\rangle = K_{1+}\rangle D_{M1+}^2 + K_{1-}\rangle D_{M1-}^2$
	$\omega = -\lambda + \mu$	$ \Psi\rangle = K_{1-}\rangle D_{M1+}^2 + K_{1+}\rangle D_{M1-}^2$
	$\omega_1 = -(\lambda + 2\mu + 3)$	$ \Psi\rangle = K_{2-}\rangle D_{M2+}^2 + K_{2+}\rangle D_{M2-}^2$
	$\omega_{2,3} = \pm \sqrt{(2\lambda + \mu + 3)^2 + 3\mu(\mu + 2)}$	$ \Psi\rangle = K = 0\rangle D_{M0}^2 + \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\lambda}{(\lambda + 2\mu + 3) + \omega_{2,3}} \times (K_{2+}\rangle D_{M2+}^2 + K_{2-}\rangle D_{M2-}^2)$
$L = 3$	$\omega_1 = 0$	$ \Psi\rangle = K_{2-}\rangle D_{M2+}^3 + K_{2+}\rangle D_{M2-}^3$
	$\omega_{2,3} = \lambda + 2\mu + 3 \pm \sqrt{(\lambda + 2\mu + 3)^2 + 15\lambda(\lambda + 2)}$	$ \Psi\rangle = K = 0\rangle D_{M0}^3 + \frac{\lambda \sqrt{15}}{\omega_{2,3}} [K_{2+}\rangle D_{M2+}^3 + K_{2-}\rangle D_{M2-}^3]$
	$\omega_{4,5} = -(2\lambda + \mu + 3) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\lambda + 8\mu + 9)^2 + 15(\lambda - 1)(\lambda + 3)}$	$ \Psi\rangle = K_{1-}\rangle D_{M1+}^3 + K_{1+}\rangle D_{M1-}^3 + \frac{\sqrt{15}(\lambda - 1)}{5(\lambda + 2\mu + 3) + 2\omega_{4,5}} \times [K_{3-}\rangle D_{M3+}^3 + K_{3+}\rangle D_{M3-}^3]$
	$\omega_{6,7} = \lambda - \mu \pm \frac{1}{2} \sqrt{(7\lambda + 8\mu + 15)^2 + 15(\lambda - 1)(\lambda + 3)}$	$ \Psi\rangle = K_{1+}\rangle D_{M1+}^3 + K_{1-}\rangle D_{M1-}^3 + \frac{\sqrt{15}(\lambda - 1)}{5(\lambda + 2\mu + 3) + 2\omega_{6,7}} \times [K_{3+}\rangle D_{M3+}^3 + K_{3-}\rangle D_{M3-}^3]$

В качестве примера приведем в табл.7 и 8 явный вид собственных функций оператора БМ в случае $L = 2$ и $L = 3$ для некоторых конкретных значений λ, μ . Заметим, что при $\mu = 0$ четность числа λ должна совпадать с четностью L .

**Таблица 7. Собственные функции оператора Баргмана — Мошинского
в явном виде для момента $L = 2$**

Собственные значения оператора БМ	Значения μ, λ, N_1, N_2	Собственные функции оператора БМ при $L = 2$
$\omega = 2\lambda + 3$	$\mu = 0 \quad N_2 = 0$ $\lambda = N_1$ четн.	$ \Psi\rangle = D_{M0}^2 + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{N_1}{N_1 + 2} \times$ $\times \left(iD_{M2+}^2 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2 \right)$
$\omega = -(2\lambda + 3)$	$\mu = 0 \quad N_2 = 0$ $\lambda = N_1$ четн.	$ \Psi\rangle = D_{M0}^2 - \sqrt{3} \left(iD_{M2+}^2 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2 \right)$
$\omega = 2\lambda + 3 = 7$	$\mu = 0 \quad N_1 = 1$	$ \Psi\rangle = iD_{M0}^2 + \frac{1}{2\sqrt{3}} D_{M2+}^2$
$\omega = -(2\lambda + 3) = -7$	$\lambda = 2 \quad N_2 = 1$	$ \Psi\rangle = iD_{M0}^2 - \sqrt{3} D_{M2+}^2$
$\omega = 2\lambda + 3 = 11$	$\mu = 0 \quad N_1 = 2$	$ \Psi\rangle = \frac{1}{3} (1 + 2t^2) D_{M0}^2 + \frac{2}{3\sqrt{3}} iD_{M2+}^2$
$\omega = -(2\lambda + 3) = -11$	$\lambda = 4 \quad N_2 = 2$	$ \Psi\rangle = \frac{1}{3} (1 + 2t^2) D_{M0}^2 - \sqrt{3} iD_{M2+}^2$
$\omega = 2\lambda + 3 = 15$	$\mu = 0 \quad N_1 = 3$	$ \Psi\rangle = \frac{3}{5} t \left(1 + \frac{2}{3} t^2 \right) D_{M0}^2 + \frac{\sqrt{3}}{5 \cdot 4} (1 + 4t^2) D_{M2+}^2$
$\omega = -(2\lambda + 3) = -15$	$\lambda = 6 \quad N_2 = 3$	$ \Psi\rangle = \frac{3}{5} t \left(1 + \frac{2}{3} t^2 \right) D_{M0}^2 - \frac{\sqrt{3}}{5} (1 + 4t^2) D_{M2+}^2$
$\omega = -(\lambda + 2\mu + 3) = -7$	$\mu = 1 \quad N_1 = 1$ $\lambda = 2 \quad N_2 = 1$	$ \Psi\rangle = \sqrt{2} \sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2$
	$\mu = 1 \quad N_1 = 2$ $\lambda = 2 \quad N_2 = 0$	$ \Psi\rangle = \sqrt{2} [i(1-t^2) D_{M2+}^2 + t\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2]$
$\omega = \sqrt{(2\lambda + \mu + 3)^2 + 3\mu(\mu + 2)} = \sqrt{105}$	$\mu = 2 \quad N_1 = 1$	$ \Psi\rangle = (1-t^2) \left[iD_{M0}^2 + \frac{2\sqrt{3}}{9 + \sqrt{105}} D_{M2+}^2 \right]$
$\omega = -\sqrt{105}$	$\lambda = 2 \quad N_2 = 1$	$ \Psi\rangle = (1-t^2) \left[iD_{M0}^2 + \frac{2\sqrt{3}}{9 - \sqrt{105}} D_{M2+}^2 \right]$
$\omega = \sqrt{105}$	$\mu = 2 \quad N_1 = 2$ $\lambda = 2 \quad N_2 = 0$	$ \Psi\rangle = (1-t^2) \times$ $\times \left[D_{M0}^2 + \frac{2\sqrt{3}}{9 + \sqrt{105}} (iD_{M2+}^2 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2) \right]$
$\omega = -\sqrt{105}$		$ \Psi\rangle = (1-t^2) \times$ $\times \left[D_{M0}^2 + \frac{2\sqrt{3}}{9 - \sqrt{105}} (iD_{M2+}^2 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2) \right]$

Таблица 8. Собственные функции оператора Баргмана — Мошинского в явном виде для $L = 3$

Собственные значения оператора БМ	Значения μ, λ, N_1, N_2	Собственные функции оператора БМ при $L = 3$
$\omega_2 = 20$	$\mu = 1 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 1$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} \left[tD_{M0}^3 + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}} D_{M2+}^3 \right]$
	$\mu = 1 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 2$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} \left\{ D_{M0+}^3 + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}} \left[tD_{M2+}^3 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^3 \right] \right\}$
$\omega_3 = -6$	$\mu = 1 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 1$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} \left[tD_{M0}^3 - \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{3}} D_{M2+}^3 \right]$
	$\mu = 1 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 2$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} \left\{ D_{M0-}^3 - \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{3}} \left[tD_{M2+}^3 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^3 \right] \right\}$
$\omega = 0$	$\mu = 1 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 2$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} \left[tD_{M2-}^3 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2+}^3 \right]$
	$\mu = 0 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 2 \quad N_1 = 1$	$ \Psi\rangle = \sqrt{1-t^2} D_{M2-}^3$
$\omega_4 = 0$	$\mu = 0 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 3$	$ \Psi\rangle = \left\{ \sqrt{1+t} D_{M1-}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M1+}^3 \right\} +$ $+ \frac{1}{\sqrt{15}} \left\{ (2t-1) \sqrt{1+t} D_{M3-}^3 + i(2t+1) \sqrt{1-t} D_{M3+}^3 \right\}$
	$\mu = 0 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 2$	$\Psi = \frac{1}{3} \left\{ (2t+1) \sqrt{1+t} D_{M1-}^3 + i(2t-1) \sqrt{1-t} D_{M1+}^3 \right\} +$ $+ \frac{1}{\sqrt{15}} \left\{ \sqrt{1+t} D_{M3-}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M3+}^3 \right\}$
$\omega_5 = -18$	$\mu = 0 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 3$	$ \Psi\rangle = \left\{ \sqrt{1+t} D_{M1-}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M1+}^3 \right\} +$ $+ \frac{\sqrt{15}}{3} \left\{ (2t-1) \sqrt{1+t} D_{M3-}^3 + i(2t+1) \sqrt{1-t} D_{M3+}^3 \right\}$
	$\mu = 0 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 2$	$\Psi = \left\{ (2t+1) \sqrt{1+t} D_{M1-}^3 + i(2t-1) \sqrt{1-t} D_{M1+}^3 \right\} -$ $- 15 \left\{ \sqrt{1+t} D_{M3-}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M3+}^3 \right\}$
$\omega_{6,7} =$ $= 3(1 \pm \sqrt{41})$	$\mu = 0 \quad N_2 = 0$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 3$	$ \Psi\rangle = \left\{ \sqrt{1+t} D_{M1+}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M1-}^3 \right\} + \frac{\sqrt{15}}{3(6 \pm \sqrt{41})} \times$ $\times \left\{ (2t-1) \sqrt{1+t} D_{M3+}^3 + i(2t+1) \sqrt{1-t} D_{M3-}^3 \right\}$
	$\mu = 0 \quad N_2 = 1$ $\lambda = 3 \quad N_1 = 2$	$\Psi = \left\{ (2t+1) \sqrt{1+t} D_{M1+}^3 + i(2t-1) \sqrt{1-t} D_{M1-}^3 \right\} +$ $+ \frac{\sqrt{15}}{(6 \pm \sqrt{41})} \left\{ \sqrt{1+t} D_{M3+}^3 + i\sqrt{1-t} D_{M3-}^3 \right\}$

10. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ПРИ ПОВОРОТЕ СИСТЕМЫ КООРДИНАТ И ОТБОР «ЭЛЛИОТОВСКИХ СОСТОЯНИЙ»

Выбранная нами (из соображений удобства) в настоящей работе система координат отличается от системы, выбранной ранее Эллиотом [9]. Следовательно, для сопоставления полученных нами собственных функций оператора БМ с функциями Эллиота нужно предварительно преобразовать эти функции от одной системы координат к другой.

Переход от эллиотовской системы координат к нашей системе осуществляется преобразованием ортов, задающих направление осей, по схеме: $e_x \rightarrow e_z$, $e_y \rightarrow -e_y$, $e_z \rightarrow e_x$, с последующим поворотом вокруг новой оси z на угол $\theta/2$. Если матрицу, преобразующую декартовы компоненты вектора при переходе от «тильдованной» эллиотовской системы координат к нетильдованной, обозначить

$$\hat{D} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{vmatrix},$$

то переход от тильдованной эллиотовской к нашей системе координат осуществляется матрицей

$$\hat{D}' = \begin{vmatrix} \alpha_{13} \cos \frac{\theta}{2} - \alpha_{12} \sin \frac{\theta}{2} & -\alpha_{13} \sin \frac{\theta}{2} - \alpha_{12} \cos \frac{\theta}{2} & \alpha_{13} \\ \alpha_{23} \cos \frac{\theta}{2} - \alpha_{22} \sin \frac{\theta}{2} & -\alpha_{23} \sin \frac{\theta}{2} - \alpha_{22} \cos \frac{\theta}{2} & \alpha_{23} \\ \alpha_{33} \cos \frac{\theta}{2} - \alpha_{32} \sin \frac{\theta}{2} & -\alpha_{33} \sin \frac{\theta}{2} - \alpha_{32} \cos \frac{\theta}{2} & \alpha_{33} \end{vmatrix}.$$

Переход от нетильдованной эллиотовской системы к нашей системе координат можно задать также тремя углами Эйлера $\alpha = \pi$, $\beta = -\frac{\pi}{2}$, $\gamma = \frac{\theta}{2}$ и, следовательно, преобразование состояний с определенным моментом L при этом будет осуществляться при помощи функций Вигнера $D^L\left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\theta}{2}\right)$.

Рассмотрим несколько конкретных примеров преобразования эллиотовских функций при переходе от исходной (эллиотовской) системы координат к нашей системе.

Пример 1. Пусть $(\lambda, \mu) = (\lambda, 0)$ и $\lambda = N_1$, $N_2 = 0$. Тогда интеграл перекрытия $(\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{N_1} (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}})^{N_2}$ при его представлении в виде суперпозиции выражений с определенным значением квантовых чисел (λ, μ) будет содержать

единственное слагаемое $(\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{N_1}$. Так как $(\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{N_1} = (\cos \beta)^{N_1}$ не зависит от углов α и γ , то его можно представить в виде суммы D -функций Вигнера с нулевыми значениями проекций момента:

$$(\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^{N_1} = \sum C_L D_{00}^L.$$

Представляя D_{00}^L в виде суммы произведений тильдованных и нетильдованных состояний: $D_{00}^L = \sum_M D_{M0}^{*L}(\tilde{\Omega}) D_{M0}^L(\Omega)$, приходим к выводу, что искомая эллиотовская функция с точностью до нормировочного множителя равна $D_{M0}^L(\Omega)$.

Преобразование этой функции к нашей системе координат осуществляется по схеме:

$$\begin{aligned} D_{M0}^L(\Omega) &= \langle LM | \hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) | L0 \rangle \rightarrow \langle LM | \hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) D^L\left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\theta}{2}\right) | L0 \rangle = \\ &= \sum_K D_{MK}^L(\alpha, \beta, \gamma) D_{K0}^L\left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\theta}{2}\right). \end{aligned} \quad (10.1)$$

При $L = 1$ это преобразование имеет вид

$$\begin{aligned} D_{M0}^1(\Omega) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta/2} D_{M1}^1(\Omega) - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta/2} D_{M-1}^1(\Omega) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\sqrt{1+t} D_{M1-}^1(\Omega) + i\sqrt{1-t} D_{M1+}^1(\Omega)]. \end{aligned}$$

Правая часть последнего равенства совпадает с одной из функций, приведенных выше в табл.8.

Пример 2. Пусть $L = 2$, $N_2 = 0$, $\mu = 0$ и λ — четное. Тогда соответствующее преобразование эллиотовской функции осуществляется по схеме $D_{00}^2 = \sum_M D_{M0}^{*2}(\tilde{\Omega}) D_{M0}^2(\Omega)$:

$$\begin{aligned} D_{M0}^2(\Omega) &\rightarrow \sum_K D_{MK}^2(\alpha, \beta, \gamma) D_{K0}^2\left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\theta}{2}\right) = \\ &= -\frac{1}{2} \{D_{M0}^2 - \sqrt{3} [tD_{M2+}^2 + i\sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2]\}. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Полученная функция также совпадает с одной из функций из табл.8.

Пример 3. Запишем пару функций с $L = 2$, $\lambda = \mu$, заданных в эллиптической системе координат:

$$\Psi_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} D_{M0}^2 - \frac{1}{2} D_{M2+}^2, \quad \Psi_2 = \frac{1}{2} D_{M0}^2 + \frac{\sqrt{3}}{2} D_{M2+}^2.$$

При переходе к нашей системе координат D_{M0}^2 преобразуется в соответствии с (10.2), а преобразование D_{M2+}^2 можно найти, пользуясь общим правилом (10.1):

$$D_{M2+}^2 = D_{M2}^2 + D_{M-2}^2 \rightarrow \sqrt{\frac{3}{2}} D_{M0}^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} [t D_{M2+}^2 + i \sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2].$$

Следовательно, функции Ψ_1 и Ψ_2 преобразуются к виду

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi'_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2} D_{M0}^2 + \frac{1}{2} [t D_{M2+}^2 + i \sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2],$$

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi'_2 = \frac{1}{2} D_{M0}^2 + \frac{\sqrt{3}}{2} [t D_{M2+}^2 + i \sqrt{1-t^2} D_{M2-}^2].$$

Преобразование системы координат без поворота на угол $\frac{\theta}{2}$ равнозначно преобразованию ортов

$$e_1 \rightarrow e_3, \quad e_2 \rightarrow -e_2, \quad e_3 \rightarrow e_1. \quad (10.3)$$

При этом функции Ψ_1 и Ψ_2 в новой системе координат запишутся в виде

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi''_1 = -\left[\frac{\sqrt{3}}{2} D_{M0}^2 - \frac{1}{2} D_{M2+}^2 \right] = -\Psi_1,$$

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi''_2 = \frac{1}{2} D_{M0}^2 + \frac{\sqrt{3}}{2} D_{M2+}^2 = \Psi_2.$$

Поясним полученный результат. При $\lambda = \mu$ выражение $\alpha_{33}^\lambda \alpha_{11}^\mu$ инвариантно относительно преобразования (10.3). Поскольку $\alpha_{33}^\lambda \alpha_{11}^\mu$ раскладывается в ряд, каждый член которого представляет собой произведение функции типа Ψ_1 или Ψ_2 на такие же функции (комплексно-сопряженные) тильдованных переменных, то инвариантность левой части равенства влечет за собой инвариантность его правой части. Следовательно, при преобразовании координат (10.3) функции Ψ_1 и Ψ_2 не изменяются. При этом, однако, допускается изменение знака функции, вследствие бинарности указанного разложения.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, задачу построения базисных функций модели двух ротаторов из произведений одночастичных функций гармонического осциллятора удастся довести до конца и в пространстве Фока — Баргмана представить эти функции в явном виде, выразив их через гипергеометрические функции, сферические функции Вигнера и собственные векторы матрицы оператора Баргмана — Мошинского. Вычисление матричных элементов различных операторов в пространстве Фока — Баргмана сводится к простой рекуррентной процедуре для гипергеометрических функций и функций Вигнера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lo Iudice, Palumbo F. — Phys. Rev. Lett., 1978, vol.41, p.1046.
2. Lo Iudice, Palumbo F. — Nucl. Phys., 1979, vol.A326, p.193.
3. De Franceschi G., Palumbo F. — Phys. Rev., 1984, vol.C29, p.1496.
4. Hilton R.R. — Z. Phys., 1984, vol.A316, No.1, p.121.
5. Михайлов И.Н., Юлдашбаева Э.Х., Бриансон Ш. — ЯФ, 1987, т.46, с.1055; Препринт ОИЯИ Р4-86-570, Дубна, 1986.
6. Draayer J.P., Weeks K.J. — Ann. Phys., 1984, vol.156, p.41.
7. Castanos O., Draayer J.P., Leshber Y. — Ann. Phys., 1987, vol.180, p.290.
8. Филиппов Г.Ф., Авраменко В.И. — ЯФ, 1977, т.37, с.597.
9. Elliott J.P. — Proc. Roy. Soc., 1958, vol.245, p.128,562.
10. Bargman V., Moshinsky M. — Nucl. Phys., 1960, vol.18, p.697.
11. Переломов А.М. — Обобщенные когерентные состояния и их применения. М.: Наука, 1987.
12. Филиппов Г.Ф., Василевский В.С., Чоповский Л.Л. — ЭЧАЯ, 1984, т.15, вып.6, с.1338.
13. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. — Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
14. Градштейн И.С., Рыжик И.М. — Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. 1965, с.349,1338.
15. Филиппов Г.Ф., Овчаренко В.И., Смирнов Ю.Ф. — Микроскопическая теория коллективных возбуждений атомных ядер. Киев: Наукова думка, 1981.

KINEMATICAL ANALYSIS OF HEAVY ION INDUCED NUCLEAR REACTIONS USING SOLID STATE NUCLEAR TRACK DETECTORS

P.A.Gottschalk, P.Vater, R.Brandt*

Kernchemie, FB 14, Philipps-Universität, D-35032 Marburg, Germany

I.E.Qureshi, H.A.Khan

Radiation Physics Division, PINSTECH, P.O. Nilore, Islamabad, Pakistan

G.Fiedler

II. Physikalisches Institut, Justus-Liebig-Universität, D-35392 Giessen, Germany

In reactions of heavy ions with heavy target nuclei, different multiplicities of heavy fragments are observed in the exit channel. These multiplicities have been found to vary between 2 and 5. The heavy reaction fragments can be recorded in Solid State Nuclear Track Detectors (SSNTD) in the form of latent damage trails which can be etched and studied using an optical microscope. Each nuclear interaction can be investigated individually by measuring geometrical parameters of the correlated tracks. Based on the method of kinematical analysis first introduced in 1979, one can quantitatively determine the properties characterising a nuclear reaction such as masses, energies, angles and other parameters. This method allowed the first exclusive investigation of heavy ion induced nuclear interactions with high multiplicities. The bulk of the reactions have been found as being due to sequential or multiple sequential fission. The reaction cross sections have been measured directly as well as derived from the elastic scattering data using semiquantal models. The present report reviews the results, obtained using SSNTDs in the study of heavy ion reactions and the analysis of reactions performed by the method of kinematical analysis. Also new and unpublished results are presented.

Во взаимодействиях ускоренных тяжелых ионов с мишенями — тяжелыми ядрами в выходном канале были зарегистрированы многофрагментные события; наблюдаемое число фрагментов варьировалось от 2 до 5. Тяжелые фрагменты регистрируются в твердотельных трековых детекторах ядер (ТТДЯ) в виде протяженных узких треков, которые могут быть протравлены и затем измерены под микроскопом. Каждое ядерное

*Visiting Scientist

взаимодействие может быть детально исследовано путем измерения геометрических параметров коррелированных треков. Основываясь на методе кинематического анализа, предложенного еще в 1979 г., можно детально определить параметры ядерного взаимодействия, такие как массы, энергии, углы вылета фрагментов и др. Этот метод впервые обеспечивает детальное исследование ядерных взаимодействий с тяжелыми ионами с испусканием нескольких фрагментов. Как было установлено, основная доля взаимодействий обусловлена каскадным делением ядер. Поперечные сечения ядерных реакций были измерены непосредственно, либо получены по данным упругого рассеяния с испусканием полуколичественной модели. Настоящая работа представляет обзор результатов исследований многофрагментных взаимодействий в реакциях с тяжелыми ионами и анализа этих взаимодействий методом кинематического анализа. Здесь представлены наиболее новые, а также неопубликованные результаты.

1. INTRODUCTION

The history of using insulating materials as particle detectors can be traced back to the late 50s. In 1958, D.A.Young [1] set the stage for the introduction of a new and versatile detection system, by optically observing the fission fragment tracks in LiF after chemical etching of the crystal. In the succeeding year, Silk and Barnes [2] reported that the radiation damage caused by fission fragments in mica is directly observable as thin long tracks when viewed through transmission electron microscope. The enlargement of these tracks by chemical etching in the case of mica was discovered by Price and Walker [3] who were unaware of the similar work done by D.A.Young. During 60s, the team of Fleischer, Price and Walker [4] greatly extended the scope of track detection methods. They demonstrated the generality of track formation mechanism due to any heavily ionizing radiation by observing tracks in a variety of insulators, including crystals, glasses and plastics. In each case, the chemicals used and conditions applied for etching could be optimized for the best revelation of tracks. In 1975, when the classical treatise [5] by these authors appeared in print, the field of Solid State Nuclear Track Detector (SSNTD) research was firmly established and its use had sprawled over dozens of fields in natural sciences, ranging from Archaeology to Geology, Astrophysics and Nuclear Physics. Another book [6] on the subject appeared a decade later, while the most recent monograph relevant to technological applications was published in 1990 [7]. The wide ranging interests of research and usage of SSNTDs can be better gauged by referring to the proceedings [8] of biannual conferences held on the subject since early 60s.

In this article we confine ourselves to the discussion of heavy ion reaction studies conducted by using SSNTDs. The physics of heavy ions has witnessed enormous growth in the preceding years. New reaction modes like subthreshold fusion, deep-inelastic scattering and quasi-fission have been identified. The

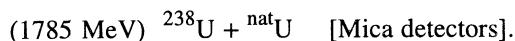
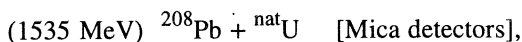
multifarious aspects of heavy ion reactions have been dealt with comprehensively in the seven volumes of «Treatise on Heavy Ion Science» [9].

The fields of heavy ion physics and SSNTDs crossed their paths rather early in their formative years. The earliest report appeared in 1963 in which Price et al. [10] presented results on the observation of three heavy fragments regarded as the evidence of the so-called ternary fission, following the reactions $\text{Ar} + \text{Bi}$, U . They used mica and phosphate glass as their detector materials. A few years later, Fleischer et al. [11] more strongly suggested that the observation of three correlated tracks in ThSiO_4 crystal is due to ternary fission following the reaction $(10 \text{ MeV/u}) \text{}^{40}\text{Ar} + \text{}^{232}\text{Th}$. Similar work was reported by Perelygin et al. [12] for the reactions $(230\text{--}380 \text{ MeV}) \text{Ar} + \text{Au}$, Bi , Th . The study of track systematics of binary and ternary events was continued by different groups [13–22] in the following years. During the course of this work, events of higher multiplicity were observed. In fact the proof of heavy ion reactions leading to four [14], five [21] and six [22] heavy reaction products in the exit channel was first provided by using SSNTD technique. In most of these studies, mica and special glasses (ZnP metaphosphate) were used as detectors. These early investigations had limited aims. The main emphasis was to prove experimentally the existence of a nuclear reaction mechanism which leads to more than two heavy fragments in the exit channel. An important result from these studies was that the probability of high multiplicity in the exit channel increases with increasing masses of the reaction partners. (The presence of light particles such as n , p , d , α , etc., is not considered in this context). The interpretation of the basic reaction mechanism was, at the best, purely qualitative. In the absence of quantitative spectroscopic results, the conclusions drawn were sometimes erroneous, e.g., the observation of three heavy fragments was interpreted by Fleischer et al. [11] as the ternary fission of a compound nucleus, however, more detailed investigations of heavy ion reactions later on showed that the fusion of very heavy nuclei at energies around 10 MeV/u resulting in the formation of compound nucleus (with its complete momentum transfer) is unlikely. For nuclei with $A > 40$ and incident energy $1\text{--}3 \text{ MeV/u}$ above the Coulomb barrier, the dominant reaction channel is of dissipative nature [23]. This reaction process called «deep inelastic scattering» is characterized by the conversion of a significant amount of injection energy to the internal excitation energy with relatively insignificant mass exchange. Thus the projectile and target, by and large, preserve their identity. The excited projectile-like or target-like nucleus or both of them may undergo normal fission as a second reaction step giving rise to three or four heavy fragments. This possibility of sequential process was first discussed by Karamian et al. [24] using the counter detectors in the study of ^{22}Ne and ^{40}Ar induced reactions on Au , Bi , Th and U . Apart from the interpretation of Refs.[11,24], alternative

reaction mechanisms were also suggested by other groups, e.g., multifragment break-up with consecutive fusion of two fragments [25], fast break-up in nuclear or Coulomb field [26], etc. Most of these concepts were applied in a qualitative sense to the multiparticle events observed with SSNTDs [27].

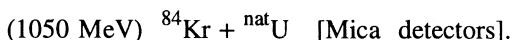
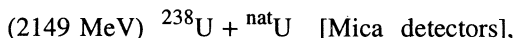
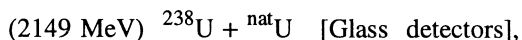
The early attempts to derive quantitative information with track detection system were based on theoretical velocity-range relations, e.g., Ait-Salem et al. [28] used the track data of fission fragments in the reaction $^{nat}\text{U}(n_{th}, f)$ to derive masses and energies. Remy et al. [29] determined masses and energies of reaction products, produced by high energy protons incident on different heavy target elements. Debeauvais and Tripier [30] studied, in the same manner, two-pronged events using deuterons as projectiles. The work of Strassbourg group [31] is based on the parameterization of theoretical velocity-range relation for certain detector materials, using α -particle ranges as reference. In this external calibration it is assumed that the behaviour of highly disturbed reaction products and detector material used for reaction studies would be identical with the projectile and detector material employed for calibration.

A completely different and more satisfactory method of calibration was evolved at Marburg [21] which can be designated as internal calibration. In this method, the entire set of exclusive data measured in a kinematically complete manner is used for the purpose of calibrating an empirical velocity-range relation for heavy fragments in the exit channel of heavy ion induced nuclear reactions. In this way the three-dimensional geometrical measurements of correlated tracks allow the determination of velocity vectors for all the fragments ensuing from the point of interaction. A complete kinematical analysis of multipronged events, therefore, becomes feasible in a simple and inexpensive manner with SSNTDs. The essential formalism of this method is discussed in sections IV.2.2. and IV.2.3. of the present review. It was first introduced and applied to the following heavy ion reactions [21],



It provided the first direct proof of the occurrence of sequential fission leading to three, four and five particles in the exit channel of a heavy ion reaction. A detailed description of the analysis and results for the reaction, $(806 \text{ MeV}) \quad ^{84}\text{Kr} + ^{nat}\text{U}$ [Mica detectors] have been published [32]. In that report the details of the method were given and kinematical analysis was fully expounded. Through a detailed analysis it was found possible to establish the sequential fission process as the major reaction mode. Also the masses, energies and centre-of-mass angles in the first as well as in the second reaction step were

determined. The use of this method was significantly broadened by later applications to reactions [33,34,35]



In the last of the above reactions, some non-equilibrium effects, not observed at the lower energy of 806 MeV were noted.

Obviously the same multifragment reaction can be studied in an exclusive experiment and analysed in a kinematically complete manner by using modern electronic detectors, fast coincidences and associated computers. In recent past, there has been impressive progress in the development [36—39] and use [40—43] of electronic detectors with nearly 4π angular coverage. However, the SSNTDs offer a marked advantage in being simple and inexpensive yet well suited for registering high multiplicity events. The data is inherently exclusive and can be analysed off-line, since the tracks are usually permanent under ordinary laboratory conditions. The portability of track detectors and minimal requirement of instrumentation (i.e., inexpensive chemicals, ordinary optical microscopes, etc.) mean that their use may be open to many laboratories of the world. There are some disadvantages of this method as well. The principal limitation is the number of analysed events which is usually rather limited owing to the manual nature of measurements. This obviously affects the statistical significance of results. The wider use of automatic image analysis systems is expected to overcome this shortcoming. Also at present the uncertainties in the measurement of individual tracks cannot be neglected and must be taken into account in the error analysis.

The experimental technique of registering the heavy ion reaction products and revealing their tracks has been applied to a large variety of projectile-target combinations interacting at different energies [21,32—35,44—64].

The present review summarizes most of this work and gives additionally some unpublished data.

2. TRACK FORMATION AND REGISTRATION PROPERTIES

The formation of tracks in solid state track detectors is very similar for protons, alpha particles and heavy ions and can be understood in terms of the «ion-explosion-spike» model [65]. The impinging positively charged ion loses its kinetic energy predominantly by the interaction with free and bound electrons within the absorbing medium. The dominant process is the ionization

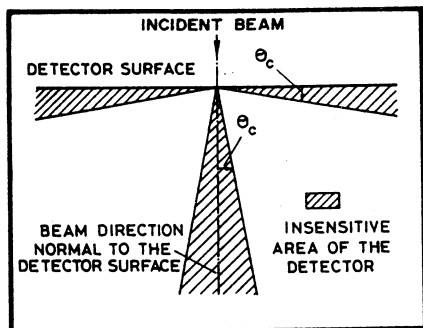


Fig. 1. «Sensitive» and «insensitive» angular intervals within an SSNTD. Tracks within the «critical» angular interval are not registered at all, or they can be measured only with relatively large uncertainties [46]

of K- or L-shell electrons. When the energy of the impinging ion is very low, nuclear stopping becomes important [66]. Details of the track formation depend on a variety of parameters, such as mass, ionization state and velocity of the incident ion, and the ionization potential of the absorbing material. Along the particle path a cylindrical zone is generated (50 to 100 Å in diameter) filled with positive ions. The positive ions repel each other, and consequently the density of the absorbing material is reduced in this region. This density reduction along the latent track has been directly observed by low-energy neutron scattering. The latent track has an increased chemical reactivity. A suitable etching medium can dissolve this region. The etching velocity along the track is higher than for the unirradiated material. This leads to an irreversible enlargement. The resultant track can be observed directly with an optical microscope.

It is important that a particle enters the detector at a certain angle with respect to its surface and that the actual track length exceeds a few μm , otherwise it will not be revealed after etching. Such a limitation in the registration of tracks is shown schematically in Fig.1. The typical critical angle Θ_c with respect to detector surface, for which the tracks are not observable, has the range $\Theta_c < (3-10)^\circ$. Furthermore only particles heavier than a critical mass m_0 are registered in an SSNTD. The SSNTD technique therefore discriminates against light particles even at very high intensities. Details of the registration thresholds may be found in Ref.[5]. Typical values for m_0 are as follows: for mica $m_0 = 30 \text{ u}$ [14], for metaphosphate glass $m_0 = 16 \text{ u}$ [56]. Important for the kinematical analysis of nuclear reactions is that the formation of latent tracks and their etching is isotropic. Exceptions are the critical angles mentioned above. The isotropic track registration properties of glass and mica were shown experimentally in Ref.[56] and Ref.[57], respectively.

3. EXPERIMENTAL

3.1. The Technique

In the investigation of heavy ion reactions with mica and glass track detectors, the registration of events can be performed in the so-called 2π - and 4π -geometry technique [14]. In the 4π -geometry the sandwich technique is available. In this technique the target is sandwiched between two sheets of the detector material. The sandwich technique is particularly useful at higher bombarding energies, e.g., $E > 750$ MeV/u. A simple and very useful method in the study of heavy ion reactions up to bombarding energies of $E_{\text{lab}} < 50$ MeV/u is the 2π -technique [27]: The target material is vacuum deposited (1—1.5 mg/cm²) onto annealed mica foils or highly polished glasses [12]. Such targets are irradiated perpendicular to their surfaces with typical fluences of about 10^6 heavy ions/cm². Fluence and target thickness are optimized as regards the amount of registered events, energy loss of the projectile in the target, spurious overlap of tracks and statistics of reaction products. In our work, the exposures have been carried out at the following heavy ion accelerators:

1. LINAC in Manchester (England),
2. ALICE in Orsay (France),
3. UNILAC in GSI, Darmstadt (Germany).

After the irradiation the target material is dissolved off in HNO_3 or aqua regia. Afterwards, the solid state nuclear track detector is properly etched so as to reveal the fragment tracks [12,14,33]. Then the sample is ready for being studied with the help of an optical microscope. The sensitive angular range is typically $5^\circ < \Theta_{\text{lab}} < 85^\circ$.

For light projectiles of high energy and for heavy targets this restricted 2π -geometry in the lab is nearly equal to a 2π -geometry in the

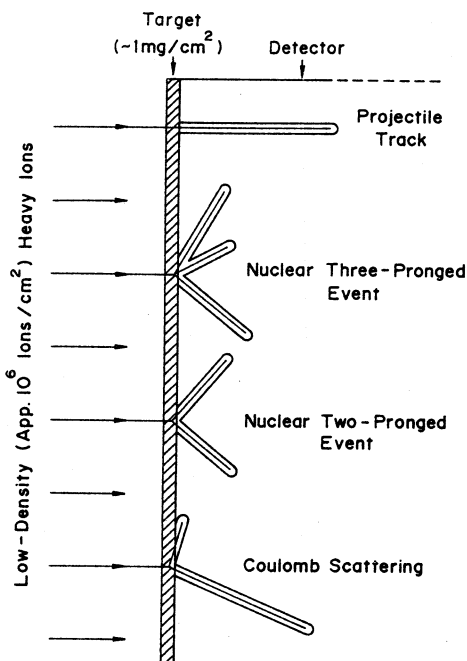


Fig. 2. Schematic representation of the 2π -geometry used in SSNTD heavy ion studies, together with the representation of some typical track configurations [14]

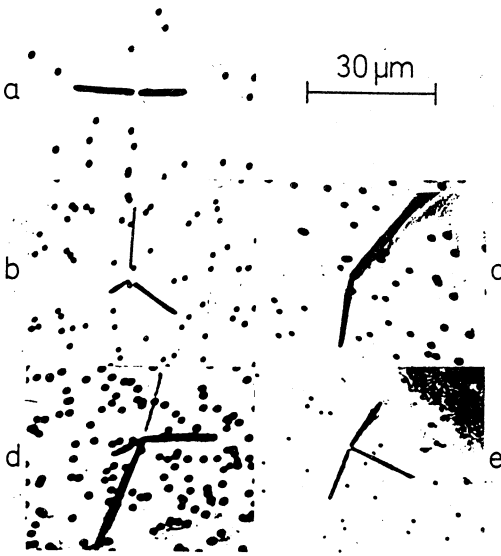


Fig. 3. Microphotographs showing tracks of projectiles (black dots) and (a) two-, (b) three-, and (d) four-pronged events, respectively, as seen in the plane perpendicular to the beam (forward hemisphere). Also shown are typical examples of «indirect» (c) three- and (e) four-pronged events. Here, at least one fragment for each multipronged event is scattered into the backward hemisphere, and is thus missing in the forward 2π -geometry [32]

centre-of-mass (c.m.) system. With increasing mass and energy of the impinging heavy ions the experimental 2π -geometry in the lab approaches effectively a 4π -geometry in the c.m. system. Particularly interesting in this regard are experiments using the so-called inverted kinematics, i.e., heavy projectile on light targets [55]. The experimental set-up and some observed track correlations are shown in Fig.2.

Typical patterns of multiprong events are shown as microscopic pictures in Fig.3. Microphotographs of nuclear reactions leading to four-pronged events (glass detectors) and five-pronged events (mica detectors) are shown in Fig.4. Tracks of impinging heavy ions which pass through the target without interaction are observable as dark spots in these figures. Multipronged events generated by nuclear reactions in the target layer and observed in the solid state track detectors underneath can easily be recognized as such, as the common origin of all correlated tracks is in the target outside the SSNTD itself. Due to the restricted 2π -geometry and the registration threshold of the detector, we sometimes miss the detection of fragments. Therefore, the true multiplicity of a multiprong events can be higher than the observed number of correlated tracks in a particular reaction. Typical examples of such so-called «indirect events» are shown in Figs.3c and 3e.

For the quoted target layer thickness and heavy ion fluence, the density of two pronged events is typically of the order of 10^{-1} events/mm². The stochastic overlap of genuine two-pronged events into an apparant four-pronged event is

Fig. 4. The same as Fig. 3 but for four-pronged and five-pronged events [21]

smaller than 10^{-4} . We can, therefore, disregard the artificial overlap of multipronged events.

The three-dimensional coordinates of correlated tracks due to multifragment interaction are measured using an optical microscope [27]. The fluence of primary heavy ions is directly determined by counting the dots as seen in Figs.3 and 4. The weight of the target material is determined with a microbalance by weighing the sample before and after depositing the target layer. In this way, our technique allows the direct determination of absolute interaction cross-sections.

The number of multipronged events and their three-dimensional coordinates are the experimental raw data. Their analysis will allow us to determine the masses, energies, momenta of the reaction products and the angles between individual fragment tracks and their mutual kinematical correlations. On the basis of this data one can obtain information concerning the reaction mechanism.

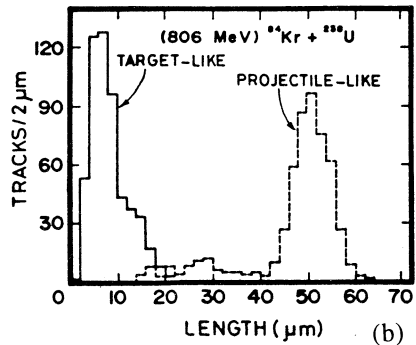
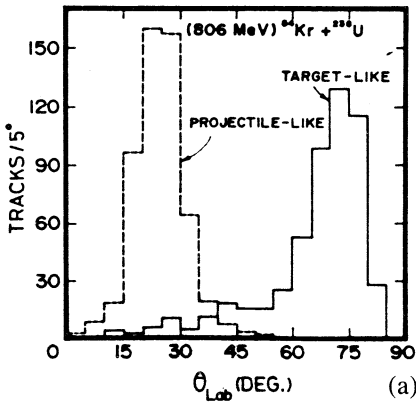


Fig. 5. Distribution of (a) scattering angles (lab) and (b) track lengths of correlated fragments in the two-body exit channel $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$ at $E_{\text{lab}} = 806$ MeV. Note the experimental cut-off at forward angles [32]

As a typical example for track lengths and scattering angles distribution, in Fig.5 the respective distributions in the case of colinear two-pronged events from the interaction (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$ are shown. (Colinearity within a plane normal to the beam is due to momentum conservation). In Fig.5 we can clearly differentiate the pair of tracks due to elastic scattering: short tracks (Fig.5b) with $\theta_{\text{lab}} \sim 75^\circ$ due to target like uranium ions and long tracks with $\theta_{\text{lab}} \sim 20^\circ$ (Fig.5a) due to the projectile-like krypton ions.

3.2. Uncertainties

The uncertainties within the experimental raw data are due to several reasons, e.g.,

1. Inaccuracies in the measurements of individual tracks.
2. Uncertainties due to straggling effects in ranges and angles.
3. Uncertainties due to the limited experimental geometry (2π).
4. Registration thresholds (e.g., $A \geq 30$ u for mica).

For experiments performed so far the following quantitative uncertainties have been reported:

1. The total interaction cross-section can be determined within uncertainties of about 13%. Only very rare events, say five-pronged events, are reported with a larger uncertainty due to their limited statistical occurrence.

2. The uncertainties in the projectile fluence determination are usually about 8%. The uncertainties in target thickness are determined to be about 6%. The statistical uncertainties in the determination of a certain category of multipronged events (multiplicity) is typically smaller than 5% when more than 400 events have been observed.

3. The uncertainty in the determination of track lengths is $\pm 1.5 \mu\text{m}$ (standard deviation) and that of angles is $\pm 2.5^\circ$ (standard deviation). These uncertainties are typical for this type of work using an optical microscope. The track measurements in mica are somewhat more accurate than in glass. Certain classes of events, in particular those having ranges smaller than $5\mu\text{m}$, are associated with untypical large uncertainties. A detailed description of possible experimental uncertainties can be found in Refs.[27,68].

The uncertainties due to range or angular straggling effects are, in general, small compared to the uncertainties in the optical microscope measurements.

Sometimes, in multipronged events we observe one very flat and short track. Calculations presented later show that these fragments were emitted backward in the c.m. system. Such tracks can barely be measured or calculated with any reasonable degree of accuracy.

Further systematic uncertainties will be described in due course in the following chapters.

4. RESULTS AND CALCULATIONS

4.1. Investigated Heavy Ion Reactions and Observed Number of Multipronged Events

The heavy ion reactions investigated so far are listed in Table 1 [21,32—35, 48,55,58,62—64]. The different projectile target combinations with incident energy (lab system) and the observed and analysed 2,3,4 and 5-pronged events are presented in this table. The event numbers are divided into three classes: Class I refers to the total events of a particular reaction channel. We are here dealing with the total number of registered and counted events. These events will be used for evaluation of the total (absolute) cross-section and for the differential angular distribution (elastic scattering). Class II refers to that subset which was measured completely (all spherical coordinates). Not all the events were suitable for a detailed quantitative analysis. Some of the events had to be rejected because of unusually large measurement errors (e.g., very shallow tracks, very steep tracks, failures in target or in detector, and the tracks with end-points in the incident channel of a projectile particle). The events subject to quantitative analysis are designated as class III events.

4.2. Kinematical Analysis of Multipronged Events

4.2.1. *Completeness.* A reaction with N (spinless) particles in the final channel is completely determined by N individual momenta and N individual masses. These $4N$ variables reduce to $4(N - 1)$ kinematically independent variables via momentum conservation and (cylindrical) symmetry around the beam axis (unpolarized beam).

The three-dimensional coordinates of coincident multitrack events provide 4, 8, 11 and 14 independent quantities for the 2-pronged, 3-pronged, 4-pronged or 5-pronged events, respectively. These independent experimental raw data are the track lengths and the track angles between the tracks and the beam axis, and the track angles between the tracks in the plane perpendicular to the beam. These experimental data are kinematically complete for the 2-pronged and the 3-pronged events. For the 4-pronged events one kinematic quantity is missing, for the 5-pronged events two kinematic quantities are missing. The kinematics of the 4-pronged and 5-pronged events can, therefore, be analysed only with additional assumptions. A realistic assumption is the conservation of the total mass for the 4-pronged events, and in addition to this, the parametric input of one sum of the masses of two arbitrary fragments for the 5-pronged events. By this procedure one missing kinematic variable of the 4-pronged and two missing kinematic variables for the 5-pronged events can be generated and a complete kinematic analysis can be carried out [21,32].

The momentum conservation does not put any constraints on the specific type of interaction between the particles participating in the nuclear reaction. The kinematic completeness implicitly assumes an unpolarized beam as given by the experimental set-up and the neglect of spin-orbit interactions of the reaction products. The mass conservation implies that all the reaction products have been detected. Thus, in particular, due to the finite detection threshold and the restricted solid angle, certain constraints arise in the methodology for the analysis of the 4- and 5-pronged channels.

4.2.2. *Conversion of track parameters into fragment masses and energies.* Experimental investigations, semiempirical methods, and theoretical considerations [4,67—72] show that a relation of the form,

$$v_i = v_i(R_i, m_i, Z_i) \quad (1)$$

exists between the range R_i and the velocity v_i of the track producing particle i (for a given solid stopping medium). Here m_i and Z_i are the mass and the charge of the i -th particle, respectively. For practical purposes, the form frequently used is [73—75],

$$R_i = k_i \cdot v_i^v \quad \text{with} \quad k_i = k_i(m_i, Z_i) \quad (2)$$

with 'v' as a free parameter. For not too high velocities, Lindhard et al. [66] have shown that $v = 1$ in the above equation if the electronic stopping is the dominant process.

The charge dependence of k_i , according to [66] is given by,

$$k_i = Z_i^{1/6} f(m_i, M) / [1 + (Z_i/Z)^{2/3}]^{3/4}, \quad (3)$$

where Z and M are the mean charge and mass of the atoms of the stopping medium. There exist arguments in the literature [76—80], that the value of k_i for different particles fluctuates around the value given by eq.(3). The reasons for these fluctuations can be attributed to the effects caused by the atomic shell structure.

For our purposes it is, however, important to note that the explicit dependence on the charge of the track producing particles for constant mass m_i and given stopping medium is extremely weak ($\sim Z_i^{1/6}$). A genuine test of the charge dependence of ranges of different isotopes is very difficult due to practical reasons. Possible variations are often hidden by experimental uncertainties. This is all the more true in the present investigations of highly perturbed fragments issuing from heavy ion reactions and the limited accuracy in the measurement of their ranges. Neglecting the explicit weak charge dependence in the subsequent analysis, we therefore use,

$$v_i = v_i(R_i, m_i). \quad (4)$$

To every track t_i we can assign a range R_i (i.e., its length) and a direction $\bar{e}_i$. Using equation (4) and the requirement of momentum conservation, it follows that

$$\sum_{i=1}^N m_i v_i(R_i, m_i) \bar{e}_i = \bar{P}_{in}, \quad (5)$$

where P_{in} is the total momentum and N is the multiplicity of the event under consideration.

The kinematic method of track analysis is based on the solution of the system of equations (5), event by event, where the general analytical form $v(R, m)$ used in Refs.[21,32,35] is,

$$v(R, m) = \sum_{\mu=0}^2 \sum_{\nu=0}^4 c_{\mu\nu} m^\mu R^\nu. \quad (6)$$

The coefficients $c_{\mu\nu}$ are determined by an internal calibration procedure discussed later. With measured R_i and $\bar{e}_i$, given total momentum $\bar{P}_{in}$ and given coefficients $c_{\mu\nu}$, the system of eqs.(5) is solvable for the unknown masses m_i . In a second step, these values are used in eq.(6) for the measured values of R_i , and each velocity v_i is determined. Then from the measured directions, $\bar{e}_i$, the velocity vectors $\bar{v}_i$ of the particles are known, and therewith all relevant kinematic quantities like kinetic energies, momenta, relative momenta of particles in different reference systems, etc.

For 4-pronged events, in addition to eq.(5) a subsidiary condition is imposed, i.e.,

$$\sum_{i=1}^4 m_i = m_P + m_T, \quad (7)$$

where m_P and m_T are the projectile and target masses respectively.

For 5-pronged events, a further condition is required. In the present work, the sum of masses of two arbitrary fragments to be held fixed, is used as a constraint for intermediate masses, i.e.,

$$m_i + m_j = m_{ij} = m \quad (m \text{ chosen as a free parameter}). \quad (8)$$

This relation is taken as a trial value of m_{ij} . With such an additional constraint the coupled equations (5) and (6) are solvable and again all the relevant kinematical variables can be obtained. The resulting kinematical

variables depend (parameterically) on the initial (trial) value m_{ij} . By varying this trial value within physically reasonable limits and changing the ten possibilities of grouping five fragments into pairs (ij) (klm), one and only one solution of eqs.(5) and (6) was found for all the analysed 5-pronged events. This solution is characterized by the fact that all the computed masses are positive ($m_i > 0$ for all i , $i = 1, 2, 3, 4, 5$) and are larger than the registration threshold of the detector, e.g., 30 u for mica or 16 u for glass.

Since light particles are not registered in the solid state track detectors, therefore, no experimental information is available on them. Consequently these cannot be explicitly incorporated in the analysis. On the other hand, it is obvious that the initially well defined kinematic relations between the primary fragments might be perturbed for the secondary fragments after the emission of light particles (for details see Ref.[32]).

Two questions arise in this connection. Firstly, Eq.(5) is based on absolute momentum conservation, whereas the secondary fragments fulfill this condition only approximately. Secondly, the track data is related to the secondary fragments, however, the masses of the primary fragments are of interest to us. In Ref.[32] it was shown that the kinematic determination of fragment masses and fragment momenta from the velocities of the *secondary* fragments and the total incident momentum provides, to a good approximation, the masses of the *primary* reaction products before the emission of the light particles. The relative error in the computed masses, in a first approximation, is given by:

$$\delta m / \Delta m_i = - (\epsilon / \epsilon + 1) (1 + 0.5\eta + (\Delta m / m_i)),$$

$$\text{with } \epsilon = m_i v_i' / v_i, \quad \eta = m_i v_i'' / v_i'. \quad (9)$$

Here δm denotes the difference between the computed mass m_i and the true (primary) mass and Δm is the difference between the primary and the secondary mass; v_i' and v_i'' are the first and the second partial derivatives of the velocity $v(R, m)$ (eq.(6)) with respect to the mass. The difference δm vanishes for mass independent velocity range relations. Velocity-range relations are, in general, only weakly dependent on the mass. For the actual velocity-range relationship (eq.(6)), it turns out [32] to be $\epsilon \approx 10^{-1}$, $\eta \approx 1$. The δm is, therefore, an order of magnitude smaller than Δm .

Further, the conclusion that δm is a positive quantity, (i.e., $\epsilon < 0$) is of interest. The algorithm described above, therefore, somewhat overestimates the primary masses.

The reasons for the validity of the above procedure for kinematic track analysis for all practical purposes, are two-fold. Firstly, the light particles (e.g., n , p , etc.) are emitted isotropically in the fragments c.m. system (evaporation).

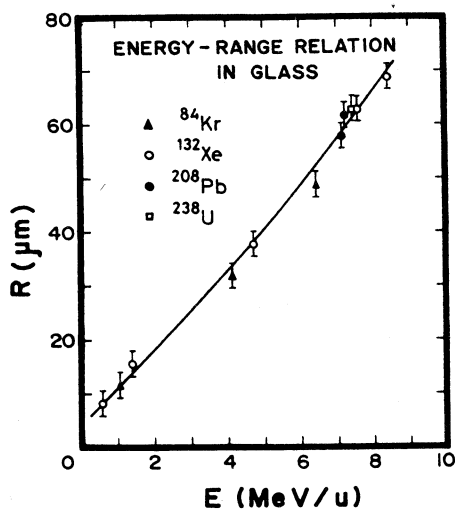


Fig. 6. Empirically determined ranges in ZnP-glass detectors for a variety of heavy ions. The ranges are shown as a function of energy per nucleon. The line shown is a mass-independent χ^2 -fit to the experimental data [56]

fragments with high velocities, as is the case with most of the investigated heavy ion reactions.

4.2.3. Velocity range relation and its calibration. Velocity-range relations can be determined by independent measurements. They are also obtainable through internal calibration. Both of these methods have been applied in Refs.[21,32—35,58]. The internal calibration has turned out to be the preferred method.

4.2.3.1. Independent calibration. From independent investigations the velocity-range data are known for different heavy ion systems at different energies [56,68,83—86]. In addition, extrapolations are available on the basis of semiempirical and theoretical models [31,69,87—89].

Figures 6 and 7 show the experimental values of ranges at different energies for glass and mica detectors, respectively. Figure 7 also shows the predictions of Northcliffe and Schilling [69] for a chosen ion mass. Bragg's additivity theorem was applied in the calculations of the semiempirical curve for mica as the stopping medium [69,90]. Bragg's theorem relates the stopping power of a compound to its individual constituents. The elements given in Ref.[69] have been incorporated in accordance with the detector composition.

This has been verified for heavy ion reactions, from deep-inelastic to quasi-inelastic reactions [81]. Secondly, although the primary and the secondary fragments have different masses, they have the same mean velocities. Because of the weak dependence of the velocity-range relationship on mass, the differences in the ranges are small for fragments with equal velocities. A necessary pre-requisite is, however, that the spectrometry is based on velocity measurements and not energy measurements [82].

Although the isotropic evaporation of light particles does not decisively influence the kinematic spectrometry, yet it leads to a further broadening of the resulting mass, momentum and energy distributions. The mean values remain preserved, but the dispersions increase. The inherent dispersion is small for

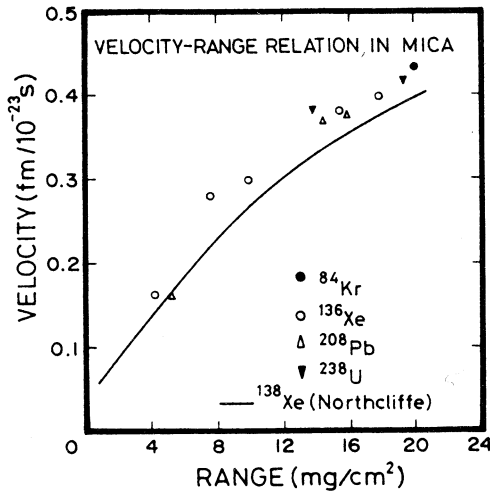


Fig. 7. Empirically determined ranges in mica (muscovite) detectors for a variety of heavy ions as a function of their velocity in the lab system. The line drawn is based on Northcliffe and Schilling's [69] tabulations for ^{138}Xe . The experimental data are taken from [68]

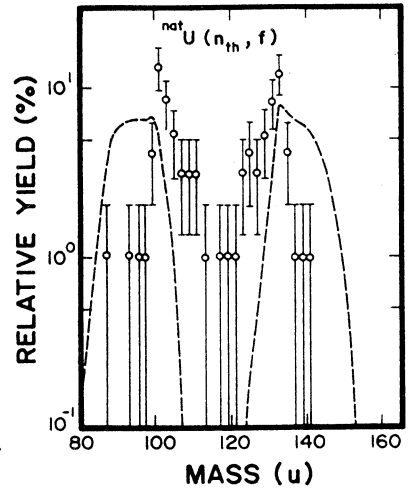


Fig. 8. Mass-yield curve for fission fragments from thermal neutron induced fission of ^{235}U . The SSNTD-data were converted with the help of a mass-independent velocity-range relation. The uncertainties quoted are due to statistical uncertainties

Also considered is the factor that heavy ions with velocities above a critical threshold do not produce etchable disturbances in glass or mica. The semi-empirical ranges calculated from Table 1 are thus corrected for their etchable component. Because of only few measured points and due to experimental uncertainty, it is impossible to reliably evaluate the eventual mass-dependence by such independent calibration. Further, it can be seen that the semiempirical ranges reproduce the experimental data only in a limited manner. The semi-empirical data of Northcliffe-Schilling have to be corrected by about 13% to 20%. This is well known for other stopping media [91]. In this situation it seems reasonable to restrict oneself to mass-independent velocity range relations, which might be extracted by a χ^2 -fit to the measured ranges.

The mass distribution of fission fragments from ^{235}U (n_{th}, f) is shown in Fig.8. It was obtained with the help of kinematic conversion of track parameters and a mass independent velocity-range relation. Also shown in Fig.8 are the experimental fragment mass distributions (dashed curve) which have been extracted by radiochemical methods [92].

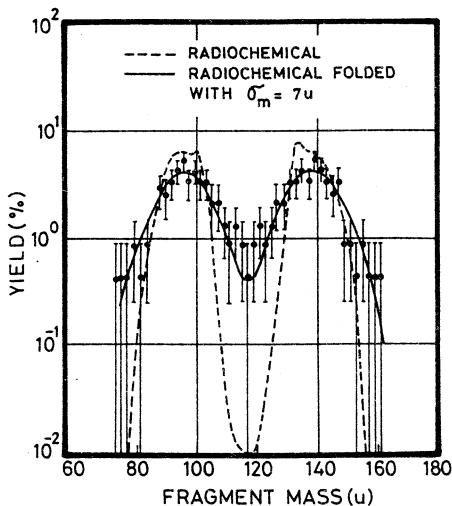


Fig. 9. Fission fragment mass yield curve for thermal neutron induced fission of ^{nat}U , obtained by a conversion of the track data based upon mass dependent velocity-range relation. The dashed line corresponds to radiochemical data. The solid line refers to the radiochemical data which are modified by the experimental uncertainty of this work ($\sigma_m = 7 \text{ u}$) [32]

The SSNTD experimental mass distribution is narrower than radiochemical data. Also, the mass-maximum of the lighter fragments of the track data is displaced towards the mass-maximum of heavier fragments,

when compared to the radiochemical data. Both trends are unreasonable. In fact the track data contain experimental errors as well as further uncertainties from angular, energy and range straggling. The neutron evaporation also leads to a further dispersion in the track data. The track data thus should have yielded significantly broader distributions than the ones from the radiochemical data. Since the χ^2 -distribution measured radiochemically may be regarded as the exact one, it, therefore, follows that the mass independence of the energy-range relation is an inadmissible simplification. Similar effects, namely, too narrow distributions and systematic displacements of light fragments towards the heavier mass peak are also known from other spectrometric fission fragment investigations with solid state track detectors and mass independent velocity range relationships [93]. Too narrow distributions and systematic shifts of heavy and light particle channels have been likewise observed in the heavy ion reaction (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{nat}\text{U}$ for the 3-particle and 4-particle channel [56], if the analysis is performed by means of a mass-independent energy-range relation.

4.2.3.2. Mass-dependent internal calibration. Figures 9 and 10 show the mass distribution and the total kinetic energy distribution, when a mass-dependent optimized velocity-range relation is employed for the situation discussed with respect to Fig.8. The broken curve in Fig.9 corresponds to the above mentioned radiochemical data. The solid curve arises from the folding of the radiochemical data with a mass uncertainty of $\sigma_m = 7 \text{ u}$. The broken curve in Fig.10 refers to counter experiments [94]. The solid curve is a least-square fit through the track detector data under the assumption of a linear dependence

Fig. 10. Distribution of total fission fragment energies versus mass split. Conversion of track data is based upon the mass dependent velocity-range curve. The dashed line refers to counter experiments [94], whereas the solid line is the regression line to the data assuming a linear dependence on the mass split [32]

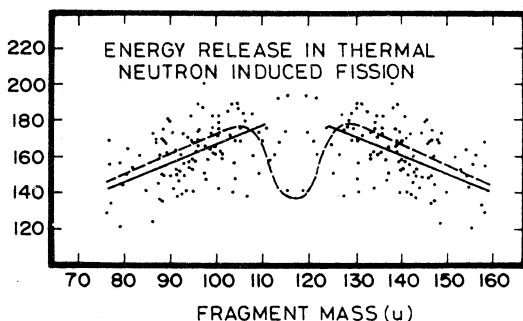
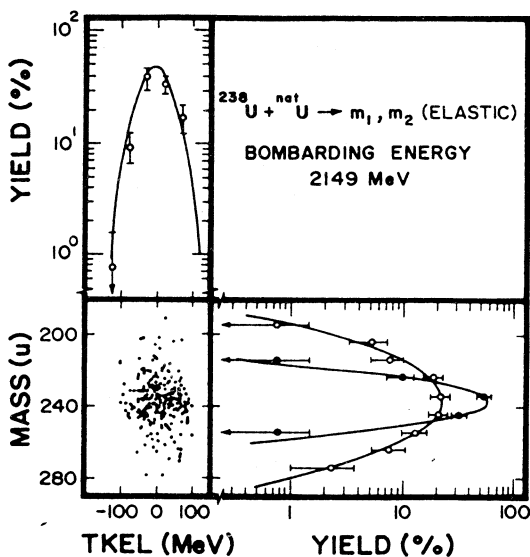


Fig. 11. Correlation plot of individual fragment masses with respect to their energies for elastic scattering in the reaction (2149 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$. The conversion of track lengths is based on an optimized, mass-dependent velocity-range relation. Only statistical uncertainties are given [58]



of fragment energies on the mass ratio between the lighter and the heavier fission products.

The coefficients of the mass-dependent velocity-range relation are obtained by a suitable choice of the coefficients in eq.(6) based on an optimal fit to the light and heavy mass peaks as well as the mean kinetic energy of the fission fragments. Figures 9 and 10 demonstrate that by this kind of internal calibration, fission fragment tracks can be analysed consistently and converted into fragment masses and fragment energies.

An analysis of the two particle channel in heavy ion reactions, fitting of the coefficients found from $U(n_{\text{th}}, f)$ to the projectile and target mass as well as to the elastic line in heavy ion scattering yields, in general, optimal velocity-range relations for all interesting masses, energies and ranges. Figures 11 and 12 demonstrate the adequacy and internal consistency of these procedures.

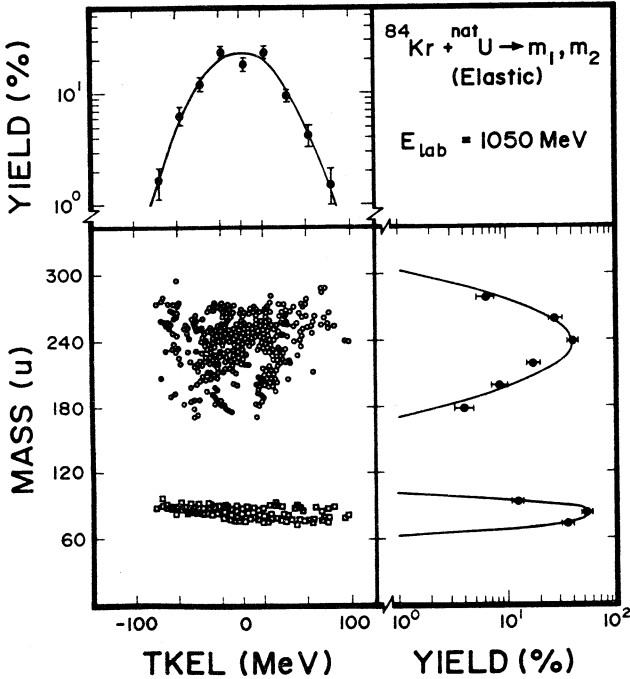


Fig. 12. Correlation plot for the masses of two-body exit channel and the TKEL. The data corresponds to elastic (+ quasi-elastic) binary events and is uncorrected for experimental uncertainties. The masses and energies were calculated using an optimized mass dependent velocity-range curve (see Fig. 15) [96]

For the 2-particle and 3-particle channels, the mass conservation

$$\sum_{i=1}^N m_i = m_P + m_T, \quad (N = 2, 3) \quad (10)$$

(m_P = projectile mass, m_T = target mass) is not used in the calibration. Consequently, a further check is provided by the comparison between the calculated sum of fragment masses and the total mass of projectile and target. This is demonstrated for the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$ (2- and 3-particle channel) in Fig.13. The agreement between the calculated and expected values is satisfactory. Refs.[21,33,45,54] arrive at the same conclusions.

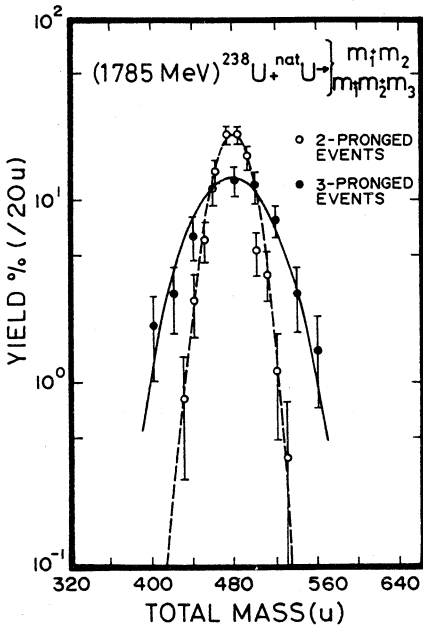


Fig. 13. Distribution of the sum of fragment masses in the 2-particle and 3-particle exit channel for the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$. The distributions are Gaussian with mean value 476 u and standard deviations $\sigma_{2m} = 17.2$ u (2-particle exit channel) and $\sigma_{3m} = 35.4$ u (3-particle exit channel)

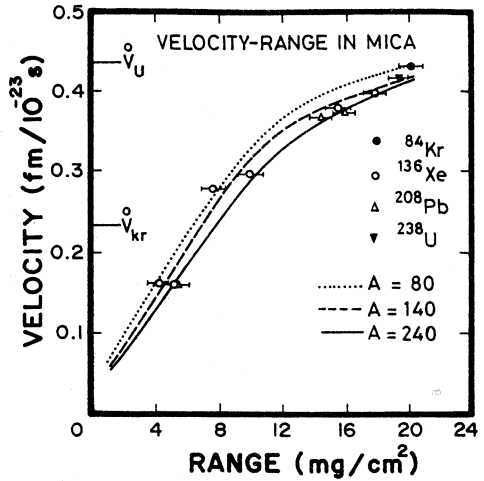


Fig. 14. Comparison of empirical velocity-range curve of this work for some selected nuclei with directly measured data. For the nuclei ^{84}Kr and ^{238}U there are also indicated the upper limits ($\hat{v}_{\text{Kr}}$ and $\hat{v}_{\text{U}}$, respectively) for the theoretically predicted region of velocity-proportional stopping [32]

Typical velocity-range relations found from internal calibration are shown in Figs. 14 and 15 for mica detectors. Also shown in Fig. 14 is the upper theoretical limit for the region of proportionality between velocity and range. One can see that this region is narrower than that predicted. This is particularly valid for very heavy ions ($A > 200$ u). The velocity range relation obtained by Qureshi et al. [35] (Fig. 15) in the case of (1050 MeV) Kr + U reaction observed with mica detectors was also compared with the calculations based on Benton and Henke's [87] theoretical model.

The velocity-range relations so found are calibration polynomials. They are valid only within their well-defined limits. They represent the best curves for the investigated track length distributions, special detectors, etching conditions and particular track producing particles. These are, therefore, not suitable for

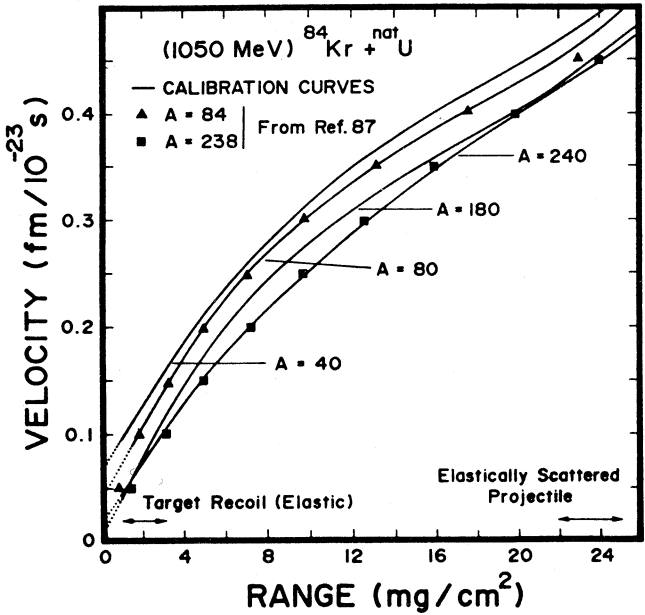


Fig. 15. Empirical velocity-range curves obtained after performing internal calibration. For comparison the calculations based on Ref. [87] are also shown. The regions of curves which are most sensitive for fitting projectile and target masses are indicated by horizontal bars with arrows [35]

extrapolations beyond their respective limits. Experience showed that for every new experiment and for each new track detector at hand, a new internal calibration had to be carried out.

4.2.4. *Error analysis and data selection.* The largest (relative) errors in the ascertained physical quantities arise from the lighter fragments and from fragments with very short tracks. This is a particular characteristic of the kinematic track analysis.

The uncertainties have been ascertained with different methods. The influence of the measurement uncertainties has been simulated by Monte Carlo methods as follows: Within the experimental uncertainties the track lengths and track angles are varied for randomly selected multiprong events. In this way, new data sets are generated event-by-event in the form of distributions. Their half-widths are a measure for the experimental error. Figure 16, e.g., shows such a statistically generated distribution for the 4-pronged event in (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$.

In the kinematic analysis of multipronged events there are also further errors besides the measurement errors. Most important are the inaccuracies because of straggling, evaporation of light particles, errors in calibration and differences in etching procedures and etching behaviour.

An estimation of the influences of all of these errors can be obtained from the width of the elastic peak (Q -value, projectile mass, target mass) and from the width of the sum of the fragment masses in the 2-pronged and 3-pronged channel. Such distributions are shown in Figs.11 and 12.

It turns out that the distribution of total fragment mass in the 3-pronged channel is significantly broader than that in the 2-pronged channel. This behaviour has been found in all the reactions. It can be traced back to the increasing number of independent quantities to be measured with increasing multiplicity of the reaction. If it is assumed that the errors of the individually measured quantities enter with equal weight into the final quantities then, to first order, the uncertainties scale as the square root of the number of independent variables. On the average, a relative error of 3.3% (standard deviation) can be deduced per degree of freedom for the determination of masses. It varies from 2.0% to 4.6%, depending on the reaction under investigation and the applied detector.

The actual analysis in Refs.[21,32—35,58] as well as in this work is restricted to events whose sum of the fragment masses in the exit channel was within two standard deviations of the expectation value. For the 4-pronged and 5-pronged events a condition was imposed that the evaluated masses of the fragments are above the registration threshold of the detector. The subset III of Table 1 refers to this restricted set. In Ref.[34] the selection was based on an additional criterion. Only those events were analysed in detail, for which the relevant kinematic variables allowed the conclusion of a sequential process.

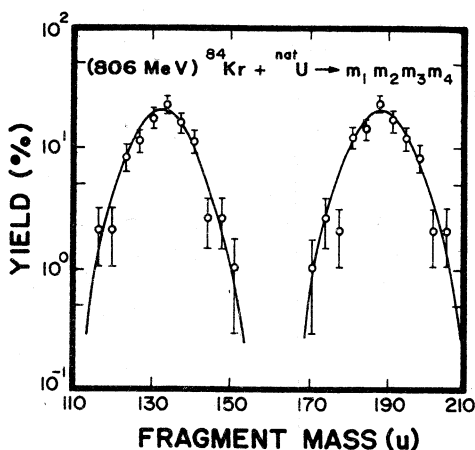


Fig. 16. Errors in the prefission masses of the observed four-pronged event in (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$ as obtained by a Monte-Carlo simulation of the inaccuracy in the track-length and track-angle measurements [32]

4.3. Total and Partial Reaction Cross-Sections

A list of measured total reaction cross-sections and partial reaction cross-sections for individual multiplicities is given in Table 2. These have been calculated according to the equation

$$\sigma_i = R_i / \Phi A, \quad (11)$$

where R_i are the number of events of i -th multiplicity observed per unit surface area, A is the number of target nuclei per surface area and Φ is the fluence of incident ions.

The 2-particle exit channel has only been included for inelastic events with $\text{TKEL} > 100$ MeV. The experimental total reaction cross-section is the sum of the partial reaction cross-sections for 2-, 3-, 4- and 5-particle channels. The quoted uncertainties include the statistical uncertainty as well as the errors in the measurement of fluence and number of target nuclei. Typical relative errors in these measurements are about 10%. The so-called «indirect» events with n -particles observed have been included in the $(n + 1)$ class. $\sigma_R^{(1/4)}$ is the total reaction cross-section, based on the experimentally observed quarter-point angle $\theta^{(1/4)}$ and calculated according to Frahn's Fresnel-Model [97]. The uncertainties in $\sigma_R^{(1/4)}$ are strictly those due to statistical uncertainties and uncertainties in the experimental determination of quarter-point angle. The total error could be possibly larger due to the difficulties in separating elastic and quasi-elastic events experimentally.

The 2π detector geometry used in this work has an obvious limitation: When we observe n fragments in one interaction, there could have been $(n + x)$ fragments in reality with x fragments emitted in the backward direction. Therefore, we consider only those events with n observed fragments as being due to the n -particle exit channels when these events are amenable to kinematic analysis for relevant multiplicity. Other cases are considered as «not been analysed kinematically». Therefore, the values given in Table 2 are lower limits for high multiplicities (i.e., $n = 4$ and $(n = 5)$ and upper limits for low multiplicities (i.e., $n = 2$ and $n = 3$).

As is shown in Table 2, the sum of the partial cross-sections for 3-, 4- and 5-particle exit channels agrees fairly well with the total interaction cross-section determined independently via the quarter point angle $\theta^{(1/4)}$. This is a reassuring experimental result.

Experimentally determined total interaction cross-sections can also be compared with theoretical calculations, based on the optical model or the «sharp-cut-off» model by Blair [98]. This gives an independent check on the reliability of the results obtained so far. The most detailed calculations have

Table 2. Total and partial reaction cross-sections

Reaction	σ_R	$\sigma_R^{(1/4)}$	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	Ref.
(806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$	2410 ± 390	2680 ± 290	150 ± 35	2235 ± 340	23 ± 11	—	[32]
(1050 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$	3201 ± 282	3389 ± 110	—	3185 ± 278	16 ± 6	—	[35]
(1539 MeV) $^{208}\text{Pb} + \text{natPb}$	(2)	(2)	(2)	(2)	(2)	—	[49]
(1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + \text{natU}$	(2)	1650 ± 250	(2)	1100 ± 130	200 ± 70	—	[21]
(2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{165}\text{Ho}$	(2)	2970	(2)	(2)	(2)	—	[55]
(2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{197}\text{Au}$	(2)	2900	(2)	(2)	(2)	—	[55]
(2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{209}\text{Bi}$	(2)	2780	(2)	(2)	(2)	—	[55]
(1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$	1840 ± 250	1640 ± 120	—	980 ± 130	850 ± 110	10 ± 7	[48]
(2149 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$	2930 ± 380	2970	—	1110 ± 140	1810 ± 240	9 ± 6	[33]
(2149 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$	3050 ± 390	2800 ± 240	—	1210 ± 170	1830 ± 240	14 ± 10	[58]
(2380 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$	2670	(2)	(2)	900	1720	35	[45]
(3975 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$	4740 ± 570	4880 ± 700	—	2880 ± 350	1770 ± 220	90 ± 20	[58]

σ_R — total experimental reaction cross-section (sum of σ_2 , σ_3 , σ_4 and σ_5); $\sigma_R^{(1/4)}$ — total experimental reaction cross-section, determined with the help of elastic scattering and quarter-point angle; (2) — not investigated in detail; — — not investigated at all.

been carried out, in this respect, for the systems, (2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{165}\text{Ho}$, ^{197}Au and ^{209}Bi [55]. In the optical model calculations, conventional Woods-Saxon parameterization according to Thomas [99] with $r_0 = 1.28$ fm as radius parameter for the nuclear potential V_N was used. The interaction parameter R_{int} and the interaction barrier B_{int} in the «sharp-cut-off» model were calculated using additionally the proximity and droplet-model as follows [100,101]: (P = projectile, T = target)

$$R_{\text{int}}/\text{fm} = 0.8425 (C_P + C_T) + 4.49, \quad (12)$$

$$C_i = r_i (1 - 1/r_i^2),$$

$$r_i/\text{fm} = 1.28 A_i^{1/3} - 0.76 + 0.86 A_i^{1/3},$$

$$B_{\text{int}}/\text{MeV} = (Z_P Z_T e^2 / R_{\text{int}} - 0.1024 \gamma \exp(2.7 - \xi) / 0.7176), \quad (13)$$

$$\gamma = 11.959 [C_P C_T / (C_P + C_T)] [1 - 1.7826 \{1 - 2(Z_P + Z_T) / (A_P + A_T)\}^2],$$

$$\xi = 4.49 - 0.1575 (C_P + C_T).$$

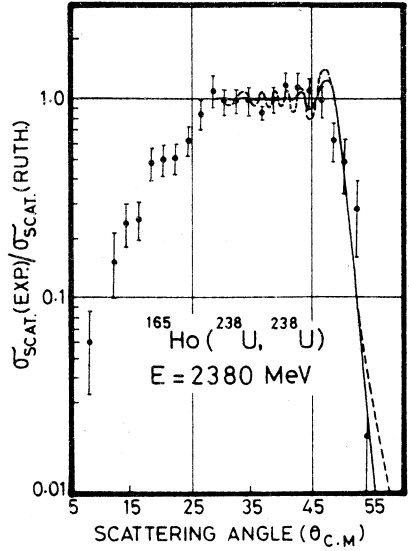
The experimental and theoretical results are shown in Table 3. The results obtained by different models agree reasonably well with each other. Additionally, the experimental and theoretical values agree also fairly well considering the experimental uncertainties. It may, however, be noted that in Table 3 the experimental cross-sections are systematically somewhat smaller than those calculated. We do not put too much emphasis on this difference since it might be due to inherent limitations of the experimental 2π -geometry

Table 3. Comparison of experimental and theoretical reaction cross-sections

Reaction	$\sigma_R^{(1/4)}$ (mb)	σ_R^{Blair} (mb)	σ_R^{opt} (mb)
$^{238}\text{U} + ^{165}\text{Ho}$ (2380 MeV)	2970	3360	3220
$^{238}\text{U} + ^{197}\text{Au}$ (2380 MeV)	2900	3320	3200
$^{238}\text{U} + ^{209}\text{Bi}$ (2380 MeV)	2780	3320	3210

$\sigma_R^{(1/4)}$ — total experimental reaction cross-section determined through elastic scattering quarter-point angle; σ_R^{Blair} — reaction cross-section, calculated with the help of the sharp-cut-off model (Blair); σ_R^{opt} — reaction cross-section, calculated with the help of the optical model

Fig. 17. Angular distribution in the elastic scattering for the reaction (2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{165}\text{Ho}$. The ratio of differential cross-sections between observed and Rutherford scattering is given. The deviation for $\theta_{\text{c.m.}} < 25^\circ$ is due to inherent technical biases of the 2π -geometry technique. The lines drawn are according to Fresnel-model (see text). Only statistical uncertainties are given [55]



technique, as pointed out earlier. In particular, if elastic as well as quasi-elastic binary events are counted as being due to elastic scattering, then one overestimates $\theta^{(1/4)}$ and calculates consequently too low a value for the cross-section $\sigma^{(1/4)}$. Consequently one obtains also too low a value for σ_R which involves the sum of all observed multipronged events ($n = 2, 3, 4$ and 5).

4.4. Elastic Scattering and Reaction Parameters

A typical angular distribution for two-pronged events due to elastic scattering is shown in Fig.17. The ratio of the experimental differential cross-section divided by the calculated Rutherford cross-section as a function of the scattering angle is shown for the reaction (2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{165}\text{Ho}$. Similar results have been obtained for other systems [55]. The quoted experimental uncertainties are strictly statistical. As mentioned earlier, the inclusion of quasi-elastic events could have introduced a systematic error. We defined all binary events as being due to elastic scattering, when $\Delta m/m = 7\%$ and $\Delta E/E = 4.5\%$ within elastic reaction kinematics. Figure 17 is based on absolute values for differential cross-sections since the total target thickness and the total heavy ion fluence are directly measured. Technical reasons are responsible for the underestimation of elastic scattering for $\theta_{\text{c.m.}} < 25^\circ$. For uranium induced reactions, in the angular range $25 \leq \theta_{\text{c.m.}} \leq 50^\circ$, one observes rather pure Rutherford scattering; here we are in the domain of rather large impact parameters between target and projectile. For the scattering angle $\theta_{\text{c.m.}} > 50^\circ$ for uranium projectile one observes directly the onset of inelastic interactions at small impact parameters resulting in a decrease of the observed ratio (Fig.17).

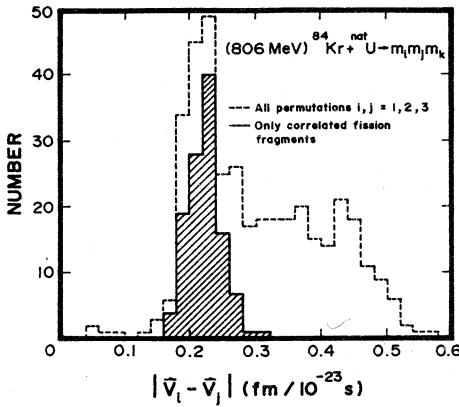


Fig. 18. Distribution of Galilean invariant $v_{ij} = |v_i - v_j|$ for $(i, j = 1, 2, 3)$ in the 3-particle exit channel for the reactions (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{U}$. The histograms show all three possible combinations of correlated pairs (ij) together with the third particle (k) . For each event we could find at least one combination of $(ij)k$ with (ij) in the limits of $v_{ij} = (0.23 \pm 0.6)\text{fm}/10^{-23} \text{ s}$ (shaded area) [32]

The exact details of this decrease are obviously due to the special characteristics of the specific nuclear interaction.

It is of considerable interest to determine accurately the angle, called quarter-point angle $\theta^{(1/4)}$, at which the experimental differential elastic scattering cross-section is 1/4 of the elastic differential Rutherford cross-section. Based on the model described in Ref.[98], one can correlate this experimental $\theta^{(1/4)}$ with the reaction parameter R_{int} , the grazing angular momentum l_{gr} and the total reaction cross-section σ_R [102—106].

4.5. Evidence for Sequential Fission

4.5.1. Correlated fragment pairs and their characteristic velocities. Sequential interactions in nuclear reactions leading to more than two particles in the exit channel have significant resonances for certain kinematical variables [107]. Let us denote two outgoing particles by i and j having masses m_i and m_j . A resonance in the Galilean invariant,

$$v_{ij}^2 = |\vec{v}_i - \vec{v}_j|^2 \quad (14)$$

at

$$v_{ij} = \overset{\circ}{v}_{ij} \quad (15)$$

describes a quasi-bound intermediate state whose decay energy E_{ij} is given by

$$E_{ij} = \frac{m_i m_j}{2(m_i + m_j)} \overset{\circ}{v}_{ij}^2. \quad (16)$$

The resonance is well defined if the lifetime of the intermediate state is sufficiently long. The decay of the intermediate state can be influenced by

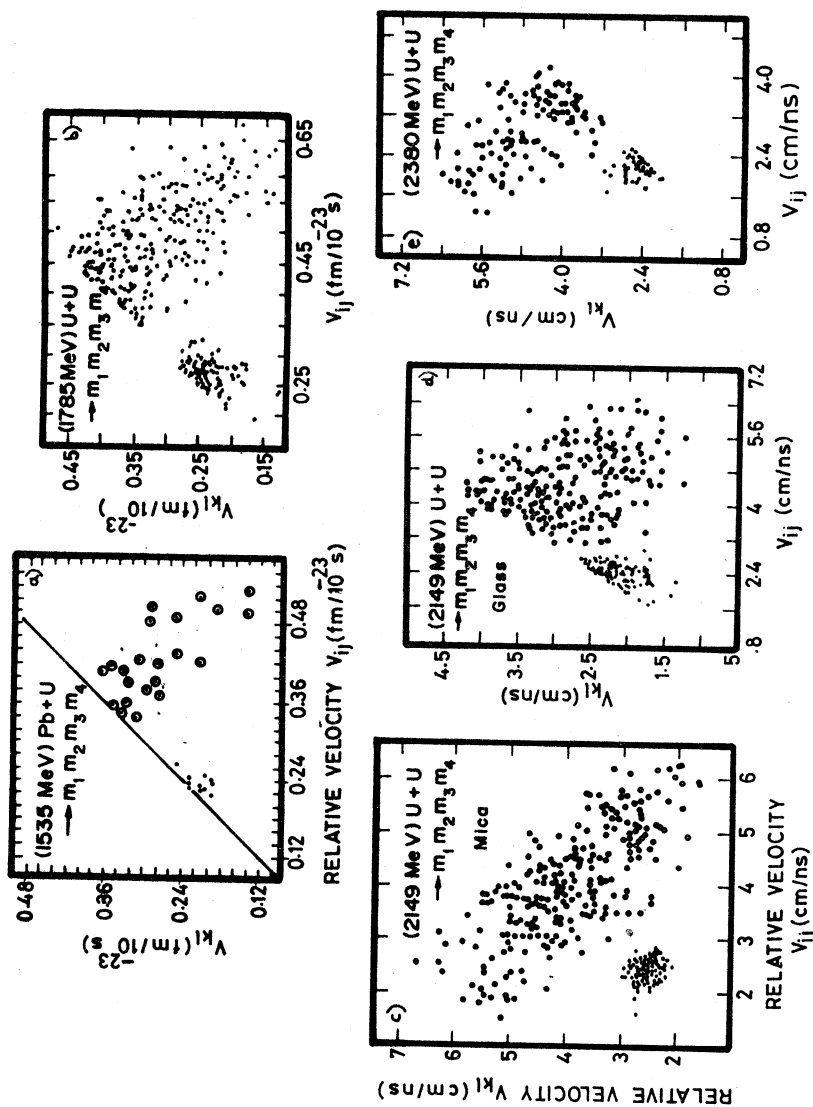


Fig. 19. Distribution of Galilean invariant v_{ij} of two fragments against that of the complementary two fragments v_{kl} ($i, j, k, l = 1, 2, 3, 4$) in the 4-particle exit channel for all three combinations. The results are shown on event-by-event basis for five different studies (a-e) [21, 33, 45, 56, 58]

other particles, resulting in the broadening of this resonance, in a shift of its position, and in non-trivial angular correlations of the outgoing products of the intermediate state.

Typical distributions of the experimental velocity differences v_{ij} for reaction products in the three-particle and four-particle exit channel are shown in Figs.18 and 19, respectively. Here we have integrated all other variables. Figure 18 shows the velocity differences v_{ij} , for different combinations to couple the pair $[ij]$ with a third particle $[k]$ in the three-particle exit channel. Figure 19 shows different possibilities to couple two pairs $[ij]$, $[kl]$ in four-particle exit channel. Corresponding to various combinatorial possibilities we obtain three results for each event displayed collectively in Fig.18 for three-pronged events and in Fig.19 for four-pronged events. For three-pronged events we have a pair v_{ij} , v_{ik} and v_{jk} . For four-pronged events v_{ij} versus v_{kl} , v_{ik} versus v_{jl} and v_{il} versus v_{jk} is plotted. In Figs.18 and 19 one can observe a striking concentration of point near the following value for relative velocity between two fragments:

$$v_{ij} = 0.23 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}. \quad (17)$$

It is important to note that for each multiprong event one observed pairs of fragments with a velocity difference in the range of

$$v_{ij} = (0.23 \pm 0.06) \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}. \quad (18)$$

In four pronged events we could always find exactly one combination $[ij]$, $[kl]$ which fitted the condition of eq.(18). This well-defined cluster can be seen in Fig.19. The other combinations give a wide scatter of points, clearly separated from this cluster.

For three-pronged events one could find at least one combination $[ij]$, $[k]$ according to equation (18). Moreover, in about 80% of all cases we have one uniquely determined combination for $v_{ij} = 0.23 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}$, while all other combinations differ significantly from this value. In about 20% of events we could observe two different combinations, e.g., $[ij]$, $[k]$ and $[ik]$, $[j]$, which satisfied eq.(18). Such a lack of uniqueness could also be observed if the two-dimensional representation was converted into a one-dimensional representation. The maximum is well observed for three pronged events at $v_{ij} = 0.23 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}$ appearing significantly above the broad background distribution. Due to this background it is possible in 20% of all cases to find more than one combination according to eq.(18).

The mean relative velocity observed in the fission of ^{235}U with thermal neutrons [108] has a value:

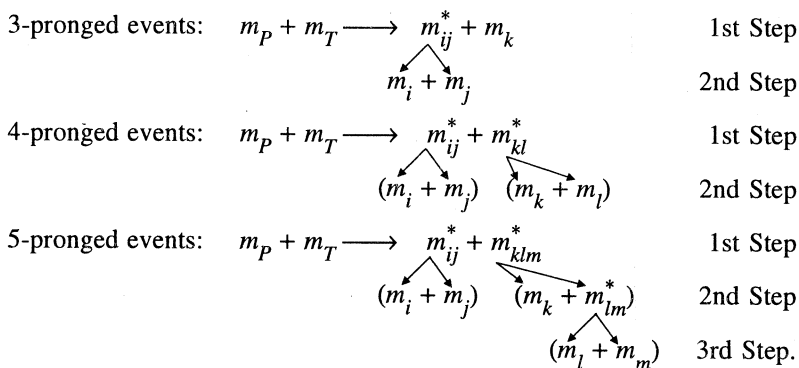
$$v_{ij} = 0.24 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}. \quad (19)$$

This value is nearly independent of the fragment mass ratio m_i/m_j between fission fragments. It changes by 2% when going from symmetric to asymmetric fission. The natural dispersion in v_{ij} for a fixed mass ratio is $0.005 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}$. The value v_{ij} (eq.(19)) is additionally nearly independent of the mass (m_{ij}) and charge (z_{ij}) of the fissioning fragment and in particular (and surprisingly) also independent of the excitation energy E_x . According to the literature [92,108,109] the following values are to be expected,

$$v_{ij} = (0.24 \pm 0.04) \text{ fm}/10^{-23} \text{ s} \quad (20)$$

for $140 \text{ u} < m_{ij} < 300 \text{ u}$; $0 \text{ MeV} < E_x < 100 \text{ MeV}$ and $1.0 < m_i/m_j < 1.5$.

The analysis of velocity differences of various multifragment channels in all investigated heavy ion reactions strongly indicates the sequential nature of the reaction mechanism. In the first step of a binary interaction, two excited ions are produced; one or both of these subsequently undergo fission in the second step of the reaction, resulting in 3 or 4 final fragments. In the case of five-pronged events one of the heavy fragments of the second step decays further sequentially. Denoting the projectile and target masses by m_P and m_T , respectively, the sequential nature of multifragment events is thus given as follows:



The fission Q values of the intermediate fissioning nuclei agree well with the semiempirical correlation of Viola [109]. The experimentally determined Q -values deviate between $\pm (4-25)\%$ from those expected theoretically. The observation of correlations in the velocity difference v_{ij} between the reaction products could be confirmed by electronic methods for the three particle exit channel in the reaction (1785 MeV) U + U and some lighter reaction systems [110,111]. To our knowledge, the occurrence of multiple sequential fission in

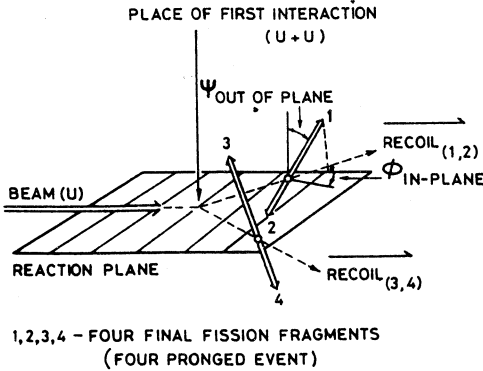


Fig. 20. Graphical description of the terms: «reaction plane», «out-of-plane» angle, and «in-plane» angle

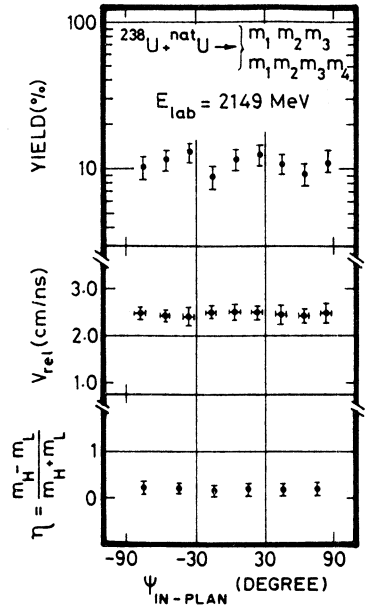
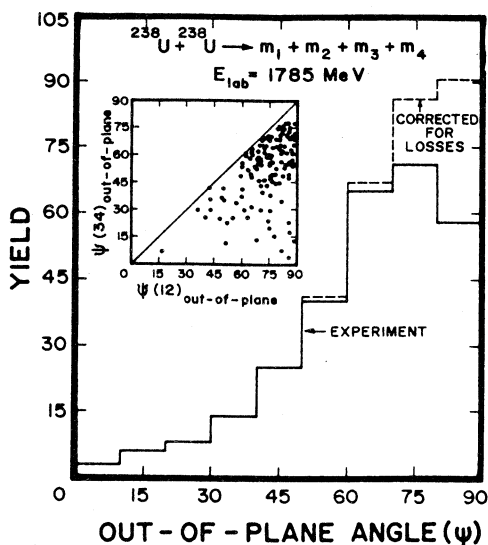


Fig. 21. Distribution of the yield for the «in-plane» angle, the relative velocity v_{ij} of correlated pairs of fission fragments, and of the asymmetry of the mass-split in fission as a function of the «in-plane» angle for the reaction (2149 MeV) $^{238}\text{U} + \text{U}$ giving 3 and 4 particles in the exit channel. Again the «dips» in the yield at $+60^\circ$ and -30° are due to technical reasons. Only statistical uncertainties are given [58]

heavy ion induced reactions leading to four or five heavy fragments in the exit channel has not been investigated so far by other methods.

4.5.2. Independence of the second reaction step for sequential fission process. In case of fast fission of a primary reaction product in the presence of the Coulomb field of the second binary reaction product, one would expect an anisotropic angular distribution in the scattering plane defined by vectors in the direction of movement of the two primary reaction products [112]. The in-plane angle is defined in Fig.20. The investigation or analysis of the in-plane angular distribution of correlated fission fragments could reveal such effects. However, experimentally it was found, that the in-plane angular distribution is isotropic within the moving c.m. system of the primary reaction products, as shown in Fig.21 (top). The observed modulation in the experimental in-plane distribution is purely technical in nature and has no physical basis. This is due to the presence of fission fragments with flight directions parallel or perpendicular to the detector surface which consequently remain undetected (see, e.g., Fig.1). Our method is not accurate enough to allow a detailed study of the influence of

Fig. 22. Distribution of the «out-of-plane» angle (defined in Fig. 20) for fission fragments from the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{U} \rightarrow 4\text{-particles}$ (outlined histogram). The dashed histogram gives a reconstructed, i.e., corrected distribution, as the 2π -geometry used is less sensitive in its registration efficiency for certain geometrical configurations [48]



the nuclear or Coulomb field of one primary reaction product on the fission configuration of the other primary reaction product.

The mass ratio distribution m_i/m_j for fission fragments and the distribution of velocity differences are independent of the fission direction as shown in Fig. 21 (rest). The out-of-plane angular distribution of fission fragments in the four particle exit channel is shown in Fig. 22. (The definition of the out-of-plane angle is given in Fig. 20). Obviously, there are no nontrivial correlations between the out-of-plane angles for both fission fragment pairs. The distribution is consistent with the product of both angular distributions. This gives an additional hint that the second reaction step is independent from the first reaction step. Nontrivial correlations for systems lighter than $\text{U} + \text{U}$ have been observed. Here it was indeed observed, that fission during the second reaction step still occurs in the presence of the first reaction partner [33]. However, these nontrivial correlations have also not been observed in the interaction of (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$, using complex electronic counter systems [110]. This result from counter experiment is confirmed by the present work based on the SSNTD technique for three and four particles in the exit channel for the interaction $\text{U} + \text{U}$ up to energies of 2149 MeV (E_{lab}). At higher bombarding energies a complete analysis of the system $\text{U} + \text{U}$ is still lacking.

4.6. The Inelastic Two-Particle Exit Channel in the Reaction (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$

4.6.1. Energy and mass distribution. The total kinetic energy loss (TKEL) in a nuclear reaction is defined as the difference of kinetic energy in the exit channel as compared to that in the entrance channel, both measured in the c.m. system. We define deep-inelastic events as the events with $|\text{TKEL}| \geq 120$ MeV.

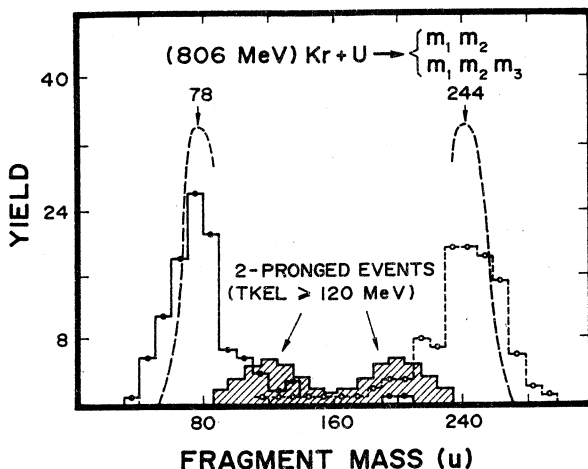


Fig. 23. Primary mass yield curve of the first reaction step in the three-body exit channel for (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$ integrated over angles and energies. Pre-fission fragments and surviving reaction products are denoted by open and full dots, respectively. The light dashed curves refer to the distributions after corrections for the experimental uncertainties ($\Delta m/m \approx 8\%$). Also displayed by the hatched histogram is the mass distribution of the deep-

inelastic component (TKEL ≥ 120 MeV) in the two-body channel (after corrections) [32]

Most of the inelastic events have TKEL ≥ 250 MeV. We can calculate the Coulomb barrier for this reaction with $R_{\text{int}} = 14.0$ fm to be $E_{\text{coul}} = 340$ MeV.

For the interaction of (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$ the c.m. energy is $E_{\text{c.m.}} = 596$ MeV.

By comparing these energies we notice that in deep-inelastic two particle events nearly complete damping has occurred for the available energy of the incoming ^{84}Kr ions. The kinetic energy of the fragments in the final channel is essentially determined by mutual Coulomb repulsion. It is typical for these reactions that we observe occasionally even larger values for TKEL [23].

Reaction products close to the projectile and target mass show nearly no energy loss. On the other hand, fragments due to deep-inelastic interactions are coupled to greater mass transfer. This mass transfer goes from the heavy partner (uranium) to the light partner (krypton). The mass distribution of deep-inelastic fragments shows two maxima at $A = 195$ and $A = 118$, Fig.23 (2-pronged events). After correction for experimental uncertainties both peaks have widths of about 45 u (FWHM). For this correction we assumed the same experimental mass resolution in both the inelastic and elastic channels.

Radiochemical studies of the system Kr + U indicated a very strong maximum at $A = 195$ («Gold finger») [113], having a rather narrow width of only about 18 u (FWHM). This is contrary to the results of our work. Our peak is rather broad. Furthermore, this peak, in the two-body channel, resembles very much the mass distribution of heavy primary fragments (1st reaction step) in three-particle exit channel, (e.g., see Fig.23). The heavy mass peak around $A = 195$ in the two-body exit channel should thus be interpreted as being due to

those primary fragments which, after a deep inelastic collision, survive subsequent decay. Therefore, a particular reaction mode which leads to «Gold finger» need not be postulated. Furthermore, it is to be noted that we worked with a very precise and high Kr energy and the above-mentioned radiochemistry work was done for lower energies down to the Coulomb barrier. Therefore this discrepancy shall not be overemphasized. Additionally, the work by Lucas et al. [114], based again on radiochemical techniques, indicated that the «Gold finger» and its narrow distribution is an experimental artefact. Lucas et al. also used a very thin target (equivalent to a very well defined and high value of ion energy) and determined the mass distribution of binary reaction products. The maximum of higher mass in this distribution was near $A = 195$ and its width was broad as observed in our work. Lucas et al. [114] speculated that angular momentum induced fission should produce predominantly fragments with $195 < A < 238$. For increasing angular momentum in the incoming reaction channel a shift of the maximum in the mass yield curve down to $A = 195$ was expected. However, due to our higher bombarding energies we should have expected a narrow mass distribution compared to the results of Lucas et al. who used a much lower bombarding energy. As we observe a rather broad experimental mass distribution we cannot support the speculation of Ref. [114].

Another theoretical calculation based on dynamical fragmentation model was carried out by Gupta [115] for the reaction $^{84}\text{Kr} + ^{238}\text{U}$. The collision process was described in mass-asymmetry coordinate using time-dependent Schrödinger equation. The Hamiltonian for the problem was constructed by making use of results derived from classical orbit equations, cranking model and BCS-formalism. He concluded that Kr + U reaction at various energies is a peripheral collision with reaction times of the order of $6 \cdot 10^{-21}$ s. Such reactions are characterized in general by low energy damping and only a few nucleon transfer. However, some specific partial waves in a narrow angular momentum window allow for a considerable mass transfer and energy loss. The mass transfer was found to take place from heavier to lighter partner of the reaction [115]. Further the cross-section for binary process is much smaller than higher multiplicities. These results are in qualitative agreement with our experiments.

4.6.2. Angular distribution. The angular distribution in the c.m. system for deep-inelastic 2-pronged events is shown in Fig. 24 (open circles). This distribution was obtained after integrating over all other variables. A strong decrease of projectile-like fragments at $\theta_{\text{c.m.}} < 25^\circ$ and for target-like recoils at $\theta_{\text{c.m.}} > 155^\circ$ is exclusively due to technical limitations of our 2π -geometry. The distribution in Fig. 24 is weakly focussed near the quarter point angle $\theta_{\text{c.m.}}^{(1/4)} = 47^\circ$. We do not observe a strong decrease towards larger angles.

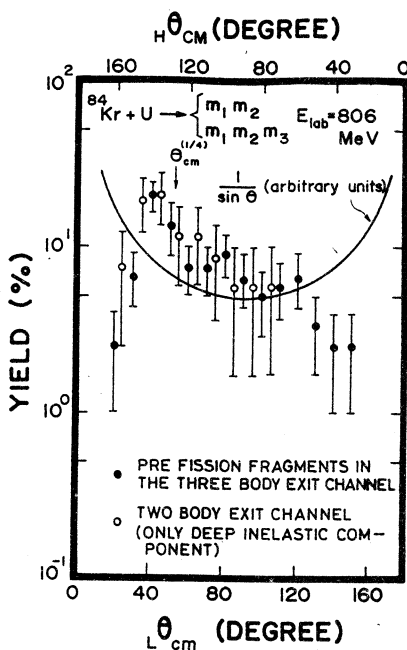


Fig. 24. Angular distribution in the c.m. system for deep-inelastic products in the first interaction step of the reaction (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{U}$, yielding 2 and 3 particles. In the 2-particle exit channel only events with $\text{TKEL} \geq 120$ MeV have been included (deep-inelastic component)

Additionally we find no sign of a $\frac{l}{\sin(\theta_{\text{c.m.}})}$ angular distribution. This

shows that compound nuclear reactions play at the best only a minor role. The reaction mechanism of multifragment break up and subsequent fusion of two other fragments requires definite maximum at forwards and backward angles, as calculated in Ref.[25]. The present experimental data do not indicate

this feature. However, one should not overlook that our 2π -geometry is not well suited experimentally to study particularly these forward and backward peaked angular effects. In Fig.24, it is seen that the deep-inelastic two-pronged events (open circles) and sequential fission (closed circles) show a very similar angular distribution.

The angular distribution classification for heavy ion reactions introduced by Galin [116] is based on a modified Sommerfeld parameter,

$$\eta' = Z_p Z_T / h\nu', \quad (21)$$

where Z_p and Z_T are the electric charges of projectile and target nucleus, respectively, ν' is the relative velocity between target and projectile at the peak of the interaction barrier. For low values of the parameter η' ($\eta' < 200$) the angular distributions in the case of inelastic events are comparatively broad with a maximum exceeding $\theta_{\text{c.m.}}^{(1/4)}$. For medium values of η' ($200 < \eta' < 250$), the angular distribution peaks in forward direction and near the quarter-point angle with equal intensity. For higher values ($\eta' > 250$) the differential cross-section is strongly focussed near the quarter-point angle. For the reaction (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + {}^{\text{nat}}\text{U}$ we calculate the modified Sommerfeld parameter η' to be equal to 260. This value is similar to $\eta' = 304$ for the

reaction (686 MeV) $^{84}\text{Kr} + {}^{\text{nat}}\text{U}$ [117]. Therefore we observe in both reactions rather similar angular distributions. In our experiment, the observed angular distribution and focusing of projectile-like fragments near quarter-point angle, strongly support the view that deep-inelastic scattering takes place for grazing collision with large mass transfer [115].

4.7. The Three-Particle Exit Channel

4.7.1. *Kinematical ambiguities.* It has been mentioned earlier that in about 20% of all three-pronged events, the pair of fragments resulting from fission could not be uniquely identified in the case of reactions induced by uranium and lead ions on uranium target nuclei. The three-pronged events observed in the interaction (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + {}^{\text{nat}}\text{U}$ had an even higher contribution of about 35% events giving two possible pairs of fragments associated with sequential fission. This means that the track configurations allow two out of three possible combinatorial possibilities to group two fragments as a pair and a third particle as a spectator: (ij) k. The relative velocity window $v_{ij} = 0.23 \pm 0.06 \text{ fm}/10^{-23} \text{ s}$ could be observed for two such combinations in each of the above-mentioned 20% of the three-pronged events.

Whenever we observed only one kinematically acceptable solution we observed predominantly a forward scattering of projectile-like fragments and the symmetric fission of the target-like heavy partner. This has to be expected as we know that all excited nuclei or nuclei lighter than uranium fission predominantly symmetrically. Therefore, in the kinematical analysis of reactions induced by Kr and Pb ions we use an additional criterion that projectile-like fragments are scattered forward in the first reaction step whenever a non-unique situation arises with respect to relative velocities.

For the reaction $\text{U} + \text{U}$ this last mentioned criterion cannot be applied. Here in the case of non-uniqueness, we selected such combinations which provided the best agreement between theoretical and empirical fission Q -values.

4.7.2. *Energy and mass distributions in the first reaction step.* The energy and mass distribution was studied for several reactions using the present method of analysis. In the following, these reactions are discussed individually.

(1) (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + {}^{\text{nat}}\text{U}$

The mass distribution in the first reaction step of the sequential process is shown in Fig.23. The light component has its maximum at 78 u while the peak of heavy component is at 244 u. The heavy component of the first interaction step decays consecutively by sequential fission. After experimental corrections, one observes a narrow mass distribution having a width of 24 u (FWHM). As in the case of inelastic two particle exit channel here also we observe a wide

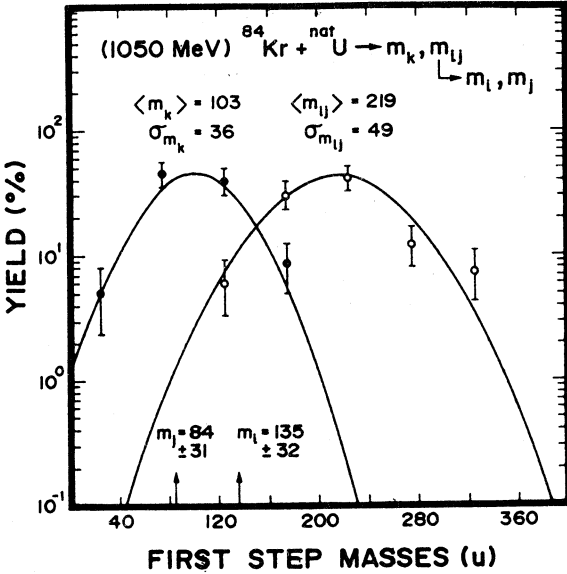


Fig. 25. The Gaussian distributions for the projectile-like mass and the pre-fission mass in the first step of the three-body channel of reaction $^{84}\text{Kr} + ^{238}\text{U}$ at 12.5 MeV/u [35]

spectrum of Q -values ranging from quasielastic interactions ($\text{TKEL} \approx 0$ MeV) up to deep-inelastic interactions.

This reaction is typical for heavy ion reactions. The two-fragment exit channel is in principle very similar to the three-particle exit channel; the only new feature in the latter case being the sequential decay of its heavy reaction partner, particularly for the reaction partners with only small mass transfer.

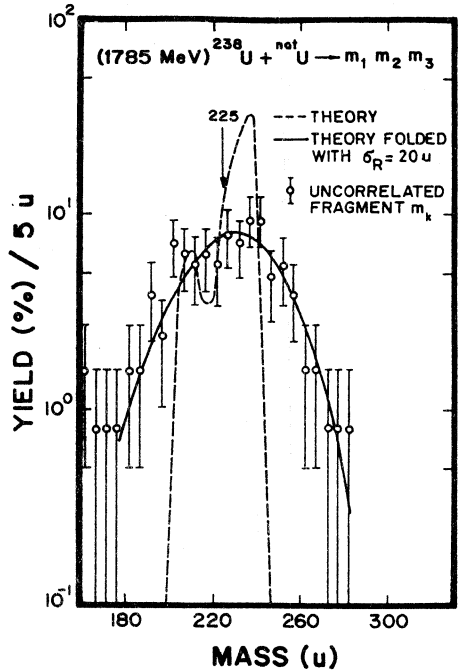
(2) $(1050 \text{ MeV}) \text{ } ^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$

As compared to reaction (1) above, here the injection energy is increased from 256 to 436 MeV. The first-step masses were fitted in terms of Gaussian distributions, as shown in Fig.25. The projectile-like mass is centered at 103 u whereas the pre-fission mass distribution has its peak at 219 u. The reason for the enhanced central value of projectile-like mass is discussed in detail in Ref.[35]. Another difference observed here with respect to the reaction (1) is the increased widths of mass distributions (e.g., from 24 u to 33 u for the projectile-like fragment).

(3) $(1535 \text{ MeV}) \text{ } ^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The maxima in the mass distributions of the two components in the first reaction step are shifted towards greater asymmetry as in (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$. The light component has its maximum at about 200 u and does not

Fig. 26. Mass distribution of surviving heavy transfer product in the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{U}$ (3-particles exit channel). Only statistical uncertainties are given. The dashed curve is given according to diffusion calculations, including shell-effects at $Z=82$, an excitation energy $E_{\text{ex}}=75$ MeV, and an interaction time of $4 \cdot 10^{-21}$ s [118]. The solid line is the same theoretical curve but folded with an experimental uncertainty of $\sigma = 20$ u



undergo any further decay. The maximum of the heavy component is at about 250 u. These intermediate heavy nuclei decay in a second reaction step.

(4) (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$

In this case the distribution of both fragments in the first reaction step is symmetrical around $A = 238$ u. The width of distribution is 28 u including experimental uncertainties. Unfolding this distribution into the surviving and decaying components yields the following results: The mass distribution of the non-fissioning component (Fig.26) has its maximum at 225 u and its intensity decreases very steeply towards heavier masses. As we know from radiochemical data, one observes practically no nuclei with masses exceeding 238 in this reaction. Therefore «surviving fragments» with masses $A > 238$ u are artifacts due to our mass resolution of $\sigma = 20$ u. The heavy prefission component peaks at 250 u. A slow decrease in the mass distribution of the heavy fragment indicates a considerable mass transfer in the first interaction step. This is a physically significant result. The system $\text{U} + \text{U}$ was studied at 1785 MeV by several groups using counter technique [102,103]. They found the centroid in the light and surviving component at $Z \approx 86-88$. This agrees fairly well with our experimental value at $A = 225$.

In Fig.26 we also compare our experimental mass distribution with the one calculated theoretically [118]. The agreement is good. Furthermore it agrees with radiochemical data [119]. We do not observe any shell effects in the mass distribution.

The reaction energy of the first step has its maximum at $\text{TKEL} = 0$ MeV, indicating quasi-elastic scattering as the predominant process. This is rather surprising as we have observed considerable mass transfer in the same interaction. However several counter experiments confirm that in the interaction $\text{U} + \text{U}$, not too far from the Coulomb barrier, one observes comparably large mass transfers together with the rather small energy dissipation [102,111].

In summary, the reaction is quasi-elastic with considerable mass transfer yielding a broad symmetric mass distribution in the first reaction step. All heavy partners with $A > 238$ in the first interaction step decay in a second sequential fission step. The light fragments survive by about 50% [see also Table 2].

(5) (2149 MeV) and (2380 MeV) $^{238}\text{U} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The mass and energy distributions of the first interaction step in the 3-particle exit channel are rather similar at 1785, 2149 and 2380 MeV. However, we observe a larger energy dissipation at the higher bombarding energies. The intermediate mass distribution is always symmetrical around $A = 238$, the surviving light component is always centered around $A = 225$ and the intermediate heavy component around $A = 250$. The mass distribution of the intermediate masses is broader at 2149 MeV with $\sigma^{(3)} = 31$ u as compared to $\sigma^{(3)} = 20$ u at 1785 MeV (Fig.26). The same features can also be seen at $E_{\text{lab}} = 2380$ MeV. Furthermore, at 2380 MeV, a quasi-elastic component with centroid at $A = 238$ u and a broad shoulder towards lighter fragments can be observed, as far as the surviving fragments are concerned. With increasing energy dissipation, the asymmetry in the first reaction step is increasing.

The average total kinetic energy loss ($\langle \text{TKEL} \rangle$) is equal to 150 MeV and (184 ± 55) MeV in (2149 MeV) $^{238}\text{U} + ^{\text{nat}}\text{U}$ as measured with glass and mica detectors, respectively. Thus the total kinetic energy loss is significantly larger as compared to (1785 MeV) $^{238}\text{U} + ^{\text{nat}}\text{U}$. The quoted value of $\langle \text{TKEL} \rangle$ is an average over all observed 3-pronged events.

4.7.3. *The distribution of scattering angle [c.m. system] in the first interaction step*

(1) (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The angular distribution in the first reaction step for three-pronged and inelastic two-pronged events has been discussed earlier in section 4.6.2. These

angular distributions are rather similar in both cases as is seen in Fig.24. A peak near quarter-point angle is strongly suggestive of deep-inelastic process.

(2) (1050 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The analysis of two-pronged events (elastic + quasi-elastic) yielded the value of quarter-point angle as $\theta_{\text{c.m.}}^{(1/4)} = (33.5 \pm 0.5)^\circ$. There was a significant fraction of three-pronged events which involved the first-step scattering angle close to this value ($\theta_{\text{lab}} \sim 24.9^\circ$) and having low TKEL. These events are clearly either due to quasi-elastic or deep-inelastic process since the initial asymmetry is almost preserved for the first reaction step. Events exhibiting the largest TKEL could be due to quasi-fission type reaction. Such events are characterized by a mass flow from heavier to lighter reaction partner and the scattering angle of projectile-like fragment much greater than the quarter-point angle. (For details see Ref.[35]).

(3) (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The angular distribution for the projectile-like reaction products of the first interaction step is concentrated around the quarter point angle ($\Theta_{\text{lab}}^{(1/4)} = 46^\circ$), indicating the predominantly quasi-elastic character for this interaction.

(4) (1785 MeV and 2149 MeV) $^{238}\text{U} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The distribution of scattering angles (c.m. system) for the two intermediate fragments produced in 1785 MeV reaction is centered around 90° as expected for such a symmetric system. The width of this distribution is 40° (FWHM). The missing of small or negative angles demonstrates the influence of the strong repulsive Coulomb force. A very similar angular distribution has been observed for the quasi-elastic events in a one-particle inclusive experiment using counter technique in the same reaction at 1766 MeV [120].

4.7.4. *Mass distribution for individual fragments in the three-particle exit channel*

(1) (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$

For all 3-pronged events of this reaction, a correlation plot between individual final masses and their corresponding energies (TKEL) is shown in Fig.27. Each event contributes three points on the scatter plot: the projectile-like fragment is shown as a filled triangle whereas both fission fragments are plotted as open circles after integrating over all angles. The total kinetic energy loss in the first interaction step shows a broad range of events originating from quasi-

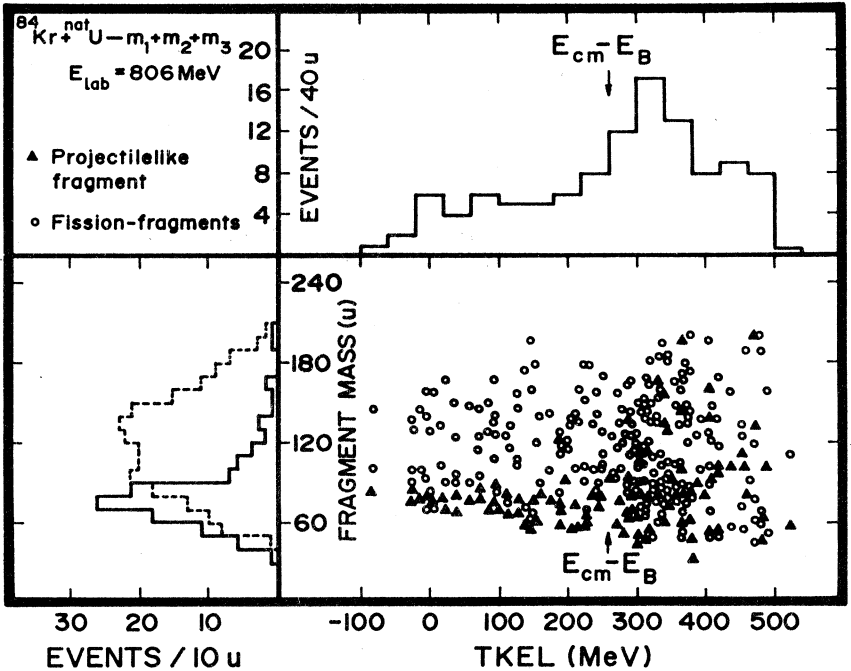


Fig. 27. Final mass distribution of the three-pronged events in (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + ^{\text{nat}}\text{U}$ integrated over angles as a function of the total kinetic energy loss (TKEL) in the first reaction step. Correlated fission fragment pairs are shown by open dots, whereas the uncorrelated spectator is referred to by the full triangle. No corrections due to experimental uncertainties have been employed [32]

elastic to deep-inelastic process. Detailed investigations have shown that the mass drift as well as the width of fission mass yield curve, increase with increasing energy dissipation. The fission fragments mass yield curve for events with large TKEL is centred around $A \cong 120$ u. For a very low TKEL, say below 100 MeV, we observe an asymmetric fission fragment mass yield curve with maxima at 100 u and 140 u, as known from the studies of low energy fission.

(2) (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The distributions of individual masses in the three-particle exit channel of this reaction are similar to Fig.27: one observes projectile-like fragments as well as light and heavy fission fragments, centered around 100 u and 150 u. The asymmetric fission mass distribution indicates a low excitation energy of the

intermediate system. This confirms the quasi elastic nature of the first interaction step.

(3) (1785 MeV and 2149 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$

As stated in Chap.4.7.2, the surviving light component is always centered around $A = 225$ u, and the intermediate heavy component (which undergoes fission) peaks at $A = 250$ u. At 1785 MeV, it can be seen from the mass yield curve that the asymmetric character of fission is still preserved. At the higher bombarding energy one can no longer see any obvious structure in the mass distribution of the final fragments. This mass yield curve is symmetric around $A = 125$ u. Defolding this distribution into the light and heavy fission fragments yields 105 u and 145 u (glass detector, Ref.[46]) and 97 u and 153 u (mica detector, Ref.[58]), respectively.

Altogether, the reaction $\text{U} + \text{U}$ is characterized by an increasing inelasticity when the bombarding energy increases.

4.8. The Four-Particle Exit Channel

4.8.1. Energy and mass distribution in the first interaction step

(1) (806 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$

The first ever four-pronged event found in heavy ion interactions was observed in this reaction. There was only one direct event detected which was analysed kinematically in detail. On the basis of this analysis, the reaction could be characterized as sequential fission process with the first step mass splitting given by,

$$(84) + (238) \rightarrow (132 \pm 7) + (190 \pm 7); \quad \text{TKEL} = (202 \pm 42) \text{ MeV}. \quad (22)$$

The quoted errors are based on Monte Carlo simulation method discussed in section 4.2.4. It is important to note that the intermediate fragments formed in the first reaction step involve a drastic mass transfer alongwith a considerable loss of energy. It shows that one can go from ^{238}U down to mass 190 (i.e., Au nucleus) in such a reaction.

(2) (1050 MeV) $^{84}\text{Kr} + \text{natU}$

It is noticeable here that the first step again involved a large mass drift of 40—60 u towards symmetry and a kinetic energy loss which is 50—80% of the entrance channel c.m. energy, along with a scattering angle well above the

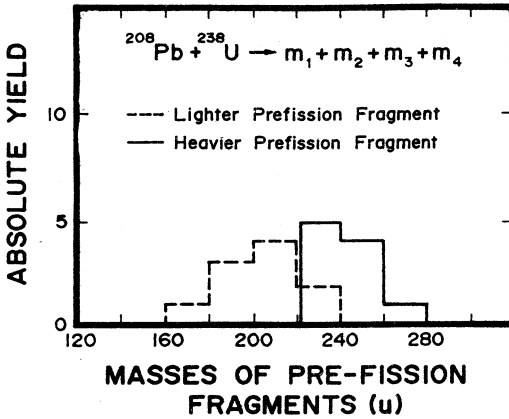


Fig. 28. Yield of first-step masses (without corrections for experimental uncertainties) in the case of (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$ reactions leading to four final masses, with separation of heavier and lighter first-step masses [47]

quarter point angle. These conditions strongly suggest the occurrence of quasi-fission phenomenon in the first step of the reaction.

(3) (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$

Here all four-pronged events could be explained in terms of sequential fission process. The mass distributions of the intermediate reaction products in the first interaction step are shown in Fig.28. The light and heavy intermediate fragments have been unfolded. These are centered at $A = 205$ u and $A = 241$ u, respectively. The project-like and target-like intermediate fragments can be clearly distinguished. Any statistically significant conclusions about mass drift or mass diffusion cannot, however, be drawn from our data.

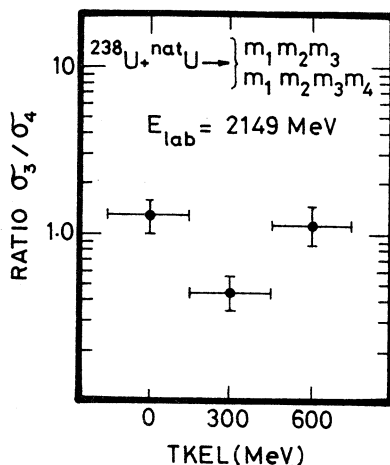
The average energy loss in the first reaction step has been found to be $\langle \text{TKEL} \rangle = 250$ MeV. The four-particle exit channel in (1535 MeV) $^{208}\text{Pb} + ^{\text{nat}}\text{U}$ is thus characterized as deep-inelastic process, in contrast to the quasi-elastic character of the three-particle exit channel. This finding is statistically significant.

(4) (1785 MeV and 2149 MeV) $^{238}\text{U} + ^{\text{nat}}\text{U}$

The mass distribution and the total kinetic energy loss in the first interaction step at 1785 MeV exhibit no statistically significant difference between 3-particle and 4-particle exit channels. Both reaction channels are predominantly quasi-elastic. Obviously, the primary mass distribution is symmetrical around $A = 238$ u.

Increasing the energy to 2149 MeV, the mass distribution in the first interaction step in 4-particle exit channel becomes narrower as compared to the 3-particle exit channel.

Fig. 29. Ratio of 3-pronged events to 4-pronged events within three intervals of TKEL-losses: (0 ± 150) MeV, (300 ± 150) MeV, and (600 ± 150) MeV. Only statistical uncertainties are given [58]



As shown in Fig.29, the ratio of the differential cross-sections at 2149 MeV,

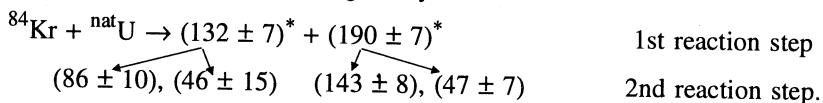
$$\frac{d\sigma_3}{d\sigma_4}(\text{TKEL}) = \frac{d\sigma_3/d(\text{TKEL})}{d\sigma_4/d(\text{TKEL})} \quad (23)$$

decreases at first with increasing total kinetic energy loss. This was expected initially. However, for ever increasing TKEL we observe an increase in this ratio. Consequently there are more 3-pronged events at the highest TKEL. This effect was first observed in Ref.[58]. The interpretation of this observation could be as follows: In the three-particle exit channel of U + U one selects with increasing energy loss those intermediate products which are coupled to the largest mass transfer observed in this reaction. One of those intermediate products has become sufficiently light so as to become stable against subsequent fission.

4.8.2. Mass distribution of individual fragments in the four-particle exit channel

(1) $(806 \text{ MeV}) \text{ } ^{84}\text{Kr} + \text{natU}$

Our calculations showed that the single four-pronged event observed in this reaction is caused by the following decay chain



The uncertainties quoted above were calculated using the Monte Carlo simulation method.

The experimental fission Q -values of the intermediate fragments agreed fairly well with the empirical values expected from Viola systematics [109] for ordinary fission, i.e.,

$$Q_{132}^{\text{exp.}} = (51 \pm 13) \text{ MeV}; \quad Q_{132}^{\text{emp.}} = 68 \text{ MeV}, \quad (24)$$

$$Q_{190}^{\text{exp.}} = (118 \pm 12) \text{ MeV}; \quad Q_{190}^{\text{emp.}} = 124 \text{ MeV}. \quad (25)$$

It is certainly premature to derive any definite conclusions from this single event. Nevertheless, it is interesting to note the rather asymmetrical mass split of both intermediate products. It might be useful to recall that very light nuclei should split asymmetrically near the so-called Businaro-Gallone point [121,122].

(2) (1785 MeV, 2149 MeV and 2380 MeV) $^{238}\text{U} + \text{natU}$

In Fig.30 the correlation of individual fragment masses and total kinetic energy loss in the first interaction step is shown event-by-event for four-

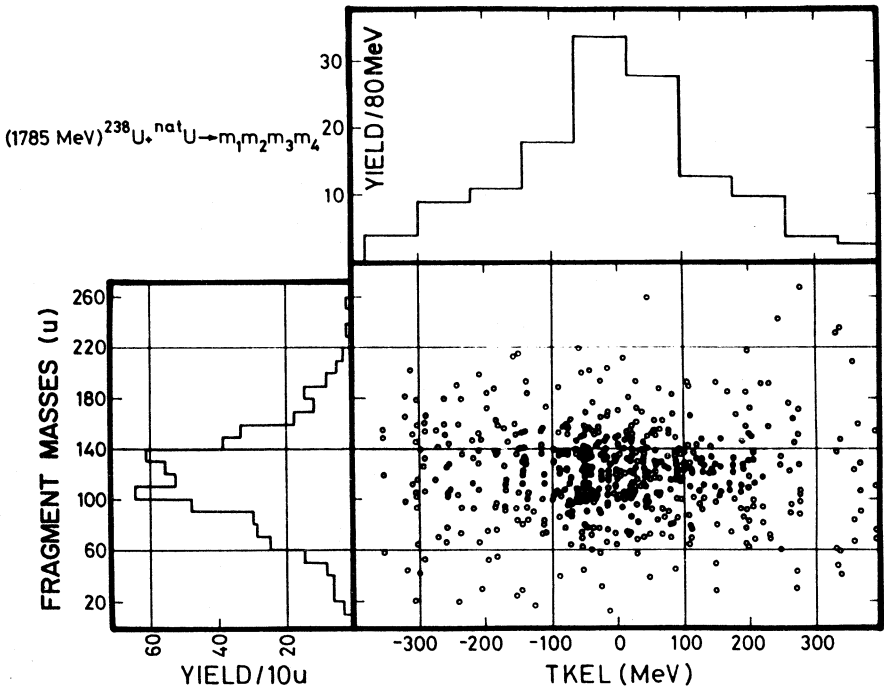


Fig. 30. Final fragment masses in the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{U}$ as a function of the total kinetic energy loss, (TKEL) in the first interaction step. The results are uncorrected for uncertainties in the mass- and energy determination

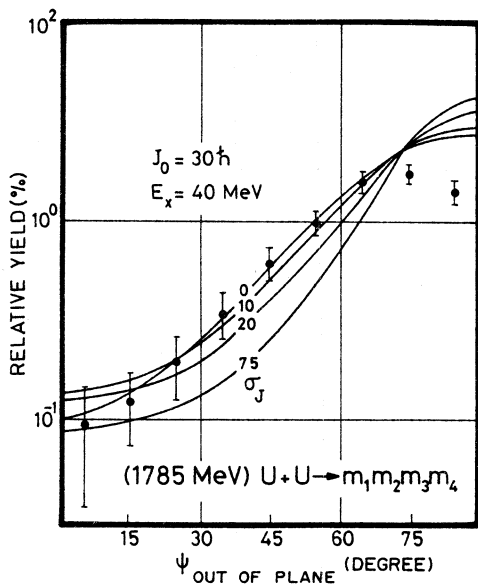
pronged events observed at 1785 MeV. The data have not been corrected for experimental uncertainties. We observe a broad spectrum in the TKEL centered around $\text{TKEL} = 0$ MeV. This indicates predominantly quasi-elastic interactions at 1785 MeV bombarding energy, resembling the quasi-elastic character of the reaction as seen in the 3-body channel. The resulting mass yield curve shows an indication of an asymmetrical mass split. It resembles the well-known mass yield curve for the fission fragments of uranium at small excitation energies.

At the higher bombarding energy of 2149 MeV the resulting mass yield curve is symmetrical. It is well centered around $A = 120$ u with a width of $\sigma_m = 33$ u (corrected for experimental uncertainties). The distribution is similar to the one observed in the three-particle exit channel.

At the even higher energy of 2380 MeV, we observe similar distributions, only with a lower statistical significance. The mass yield curve is again centered around $A = 120$ u and the fission Q -value is 169 MeV, just as expected for the fission of an uranium-like nucleus.

4.8.3. Angular distribution of fission fragments. In Fig.31 the out-of-plane angular distribution of final fragments in the four-particle exit channel for the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{nat}\text{U}$ is shown (for the definition of the out-of-plane angle see Fig.20). The distribution of fission fragments is strongly focussed within the «scattering plane», defined by the momentum vectors of the two reaction products after their first interaction step. Due to our limited

Fig. 31. «Out-of-plane» angular distribution of fission fragments for the reaction (1785 MeV) $^{238}\text{U} + \text{U} \rightarrow 4$ fragments, together with calculations based on the «charged-rotating-liquid-drop» model. The missing cross-section for $\psi_{\text{out}} \sim 90^\circ$ is due to technical reasons described in the text. The best fit could be obtained as follows; mean angular momentum window $J = 30 \hbar$, mean excitation energy $E_x = 40$ MeV, angular momentum window $\sigma_j \leq 10 \hbar$. The calculations are based on the assumption of complete polarization ($J = M$) [21]



registration efficiency within the 2π -geometry SSNTD-Technique we lose about 30% of all events, in particular close to $\Psi_{\text{out}} \sim 90^\circ$.

The lines drawn in Fig.31 show the results of theoretical model calculations. Assuming completely polarized intermediate nuclei, we calculated the angular distribution as follows:

$$W(\Psi_{\text{out}}) = \sum_J \rho(J) \sum_{J=-K}^{+K} \rho(K) \left\{ |D_{J,K}^J(\Psi_{\text{out}})|^2 + |D_{J,-K}^J(\Psi_{\text{out}})|^2 \right\}, \quad (26)$$

where $\rho(J)$ and $\rho(K)$ are suitable distribution functions for angular momentum J and its projection on the symmetry axis of the fissioning nucleus. $D_{J,K}^J$ are the wave functions of a symmetrically deformed spinning top.

The model assumes symmetrically deformed fissioning nuclei. It is, furthermore, based on level densities, deformation parameters and moments-of-inertia of an excited charged-liquid-drop rotating at the saddle-point deformation with all intrinsic degrees of freedom in thermal equilibrium. In the calculations we used as pre-fission mass, $A = 238$ and a level density parameter $a = A/10$ (MeV^{-1}). Angular momentum dependent equilibrium deformations, moments-of-inertia, and fission barriers were taken from Ref.[123].

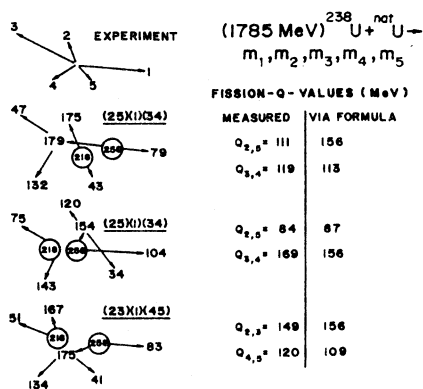
The best fit to the experimental data could be obtained using as mean excitation energy of the fissioning nucleus $\langle E_x \rangle = 40$ MeV and average angular momentum $\langle J \rangle = 30 \hbar$, having a width of $\sigma_J \leq 10 \hbar$. This average angular momentum is somewhat lower than that calculated with the «sticking» model. For this sticking model the angular momentum can be estimated as $J = \frac{1}{7} l_{\text{gr}} = 74 \hbar$. The width of the K -values, as obtained by calculations, varied between $10 \hbar$ and $14 \hbar$. This is the same order of magnitude, as has been used empirically for uranium-like nuclei previously [92].

We obtained qualitatively the same results for the reactions (1535 MeV) $\text{Pb} + \text{U}$, (2149 MeV) $\text{U} + \text{U}$ and (2380 MeV) $\text{U} + \text{U}$. In each case, we observed a strong focussing of fission events within the reaction plane.

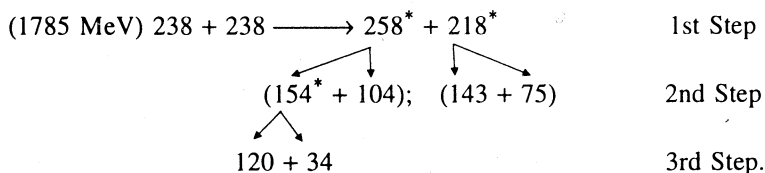
4.9. The Five-Particle Exit Channel

This very rare decay process occurring in heavy ion reactions can be studied with the SSNTD-technique. So far, roughly two dozen five-pronged events have been observed in $\text{U} + \text{U}$ interactions at different bombarding energies. Only two of these events have been completely analysed, one at 1785 MeV and the other at 2149 MeV (see Table 1). For the lower bombarding energy (1785 MeV) we obtained three different sets of physically reasonable solutions, as shown in Fig.32. All solutions are compatible with a multiple

Fig. 32. Schematic representation of the trajectories of a five-pronged event. Three combinational possibilities shown in the figure are consistent with multiple sequential fission process [48]

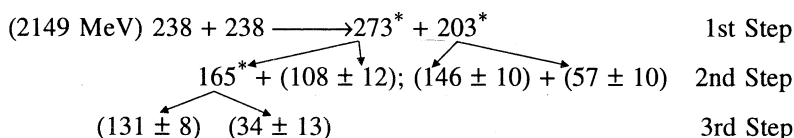


sequential decay process taking place in three distinct reaction steps. The solution with the best agreement between experimental and Viola-type fission Q -value systematics [109] is given as follows:



The experimental fission Q -values of the intermediate reaction products 154 u and 218 u are $Q_{154} = 84$ MeV and $Q_{218} = 169$ MeV. As can be seen in Fig.32, the agreement between the experimental and empirical Q -values is quite remarkable. This shall, however, not be overemphasized. We determined the relative uncertainties in the nuclear masses to be approximately ± 15 u and in the Q -values to be $\Delta E/E = 20\%$. Here we used again Monte Carlo simulation calculation. The energy damping in the first interaction step could be calculated only approximately due to the experimental uncertainties in the track parameters: TKEL (first step) = (200 ± 100) MeV. This indicates that the relative kinetic energy in the entrance channel, $E_{\text{c.m.}} - E_{\text{coul.}} = 165$ MeV, has been almost completely damped in this interaction.

The analysis of the five-pronged event observed at 2149 MeV confirms the sequential reaction mechanism. This event could be analysed as follows:



with

$$Q_{203}^{\text{exp.}} = (127 \pm 18) \text{ MeV} \quad \text{and} \quad Q_{203}^{\text{emp.}} = 138 \text{ MeV},$$

$$Q_{165}^{\text{exp.}} = (84 \pm 26) \text{ MeV} \quad \text{and} \quad Q_{165}^{\text{emp.}} = 98 \text{ MeV}.$$

The TKEL (first interaction step) = $(490 \pm 60) \text{ MeV}$, which is to be compared with $(E_{\text{c.m.}} - E_{\text{coul.}}) = 250 \text{ MeV}$.

Both five-pronged events are thus attributable to the multiple sequential fission process where in the first interaction step two excited primary fragments are formed as a result of binary deep-inelastic interaction. The first step is characterized by complete energy damping and considerable mass transfer ($\sim 20\text{--}30 \text{ u}$). In the second step the lighter of the two primary fragments undergoes subsequent single fission whereas the heavier fragment fissions sequentially in steps 2 and 3.

The mass asymmetry is remarkable. The asymmetry value has been determined for both events and seems to increase with increasing sequential reaction steps.

$$(1785 \text{ MeV}): \quad \eta(258) = 0.194, \quad \eta(218) = 0.312, \quad \eta(154) = 0.558,$$

$$(2149 \text{ MeV}): \quad \eta(273) = 0.216, \quad \eta(203) = 0.438, \quad \eta(166) = 0.590.$$

CONCLUSION

The investigation of heavy ion induced nuclear reactions with a high multiplicity in the exit channel using the SSNTD (Solid-State-Nuclear-Track Detectors) has opened an interesting research field. A simple and effective method has been introduced to extract from the experimentally observed track parameters the inherent physical parameters, such as masses, Q -values and energies. This method is basically exclusive. Kinematically complete spectroscopic information on the intermediate and final reaction products could be obtained for the 2-, 3-, 4- and 5-pronged events. Also the reaction mechanism could be identified. The kinematical analysis was applied to a number of heavy ion induced nuclear reactions mostly with ^{238}U as the target. Using this technique it was shown for the first time by direct experimental evidence that heavy ion interactions leading to 3, 4 or 5 particles in the exit channel are sequential in nature. From the measured lengths and the directions

of correlated tracks, it could be inferred that the high multiplicity reactions are consistent with a binary first reaction step followed by a sequential fission of one or both of the two primary reactions products. Within our experimental uncertainty, no final state interactions between the fragments could be determined, i.e., all our data are consistent with a reaction pattern where the primary products escape the range of their initial nuclear interaction prior to a decay via sequential fission process. This interpretation has been confirmed with other experimental techniques and is now generally accepted.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors want to thank the staff of the LINAC in Manchester and the UNILAC in Darmstadt for kindly arranging the irradiations with heavy ions. Stimulating discussions with many colleagues are acknowledged. The help of Dr.K.Rashid (ICCC, Islamabad) in preparing earlier versions of this script is greatly appreciated. We have to thank the Pakistan Atomic Energy Commission (PAEC, Islamabad), in particular Dr.Ishfaq Ahmad, Chairman, PAEC and Dr.N.A.Khan and Dr.I.H.Qureshi, former Directors of PINSTECH (Islamabad), the International Office of the Kernforschungs-Zentrum Karlsruhe (KfK, Karlsruhe), the Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD, Bonn) and the Alexander-von-Humboldt Foundation (Bonn) for making possible mutual working visits in Pakistan and Germany. This work was supported in part by the PAEC (Islamabad), the BMFT (Bonn), the DFG (Bonn), the GSI (Darmstadt), the IAEA (Wien) and others.

REFERENCES

1. Young D.A. — *Nature*, 1958, vol.182, p.375.
2. Silk E.C.H., Barnes R.S. — *Phil. Mag.*, 1959, vol.4, p.970.
3. Price P.B., Walker R.M. — *J. Appl. Phys.*, 1962, vol.33, p.2625.
4. Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M. — *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 1965, vol.15, p.1.
5. Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M. — «*Nuclear Tracks in Solids*», University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London, 1975.
6. Durrani S.A., Bull R.K. — «*Solid State Nuclear Track Detection*», Pergamon Press, Oxford, 1987.
7. Spohr R. — «*Ion Tracks and Microtechnology*», Vieweg, Germany, 1990.
8. «*Nucl. Tracks Radiat. Meas.*», Special Volumes, 1984, No.8, 1986, No.12, 1988, No.15, 1990, No.19. References to earlier conferences therein.
9. Bromley D.A., Ed. — «*Treatise on Heavy Ion Science*», Plenum Press, New York, 1984.
10. Price P.B., Fleischer R.L., Walker R.M., Hubbard E.L. — In: «*Proc. Third Conf. on Reactions between Complex Nuclei*», Asimolar, University of California Press, Berkeley, 1963.

11. **Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M., Hubbard E.L.** — Phys. Rev., 1966, vol.143, p.943.
12. **Perelygin V.P., Shadieva N.H., Tretiakova S.P. et al.** — Nucl. Phys., 1969, vol.A127, p.577.
13. **Vater P., Brandt R.** — Radiochimica Acta, 1974, vol.21, p.191.
14. **Vater P., Becker H.J., Brandt R.** — J. Radioanal. Chem., 1976, vol.32, p.275.
15. **Vater P., Becker H.J., Brandt R.** — Nucl. Instrum. Meth., 1977, vol.147, p.271.
16. **Fiedler G., Haag R., Aschenbach J., Rautenberg T.** — Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt Report GSI-J-1-77, 1977, p.131.
17. **Fiedler G., Aschenbach J., Otto W. et al.** — Nucl. Instrum. Meth., 1979, p.147, p.35.
18. **Grabez B., Todorovic Z., Antanasijevic R.** — Proceed, 10th Intern. Conf. on SSNTD, Lyon, 1979, Pergamon Press, 1980, p.899.
19. **Debeauvais M., Jokic S., Tripier J.** — Proceed. 10th Intern. Conf. on SSNTD, Lyon, 1979, Pergamon Press, 1980, p.927.
20. **Vater P., Becker H.J., Brandt R. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1977, vol.39, p.594.
21. **Gottschalk P.A., Vater P., Becker H.J. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1979, vol.42, p.359.
22. **Debeauvais M., Ralarosy J., Tripier J. et al.** — Nucl. Tracks, 1984, vol.8, p.515.
23. **Schroeder W.U., Huizenga J.R.** — Damped Nuclear Reaction. In: «Treatise on Heavy-Ion Science, ed.: D.A.Bromley, vol.2, Plenum Press, New York, 1984, p.115.
24. **Karamyan S.A., Oganessian Yu.Ts., Pustynnik B.I. et al.** — In: «Physics and Chemistry of Fission», IAEA, Vienna, 1969, p.759.
25. **Deubler H.H., Dietrich K.** — Phys. Lett., 1976, vol.62B, p.369.
26. **Backe H., Weik F., Butler P.A. et al.** — Phys. Rev. Lett., 1979, vol.43, p.1077.
27. **Vater P.** — Dissertation, Marburg, 1976.
28. **Ait-Salem M. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1968, vol.60, p.45.
29. **Remy G. et al.** — J. Phys., 1970, vol.31, p.27.
30. **Debeauvais M., Tripier J.** — Nucl. Instr. and Meth., 1980, vol.173, p.157.
31. **Tripier J. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1974, vol.115, p.29.
32. **Gottschalk P.A., Grawert G., Vater P., Brandt R.** — Phys. Rev., 1983, vol.C27, p.2703.
33. **Haag R., Fiedler G., Ulbrich R. et al.** — Z. Phys., 1984, vol.A316, p.183.
34. **Vater P. et al.** — Nucl. Tracks Radiat Meas., 1986, vol.11, p.5.
35. **Qureshi I.E. et al.** — Nucl. Phys., 1988, vol.A477, p.510; Phys. Rev., 1988, vol.C37, p.393.
36. **Bougault R. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1987, vol.A259, p.473.
37. **Rudolf G. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1991, vol.A307, p.325.
38. **Fowler M.M. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1989, vol.A281, p.517.
39. **Drain D. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1989, vol.A281, p.528.
40. **Andrew J. et al.** — Phys. Rev., 1992, vol.C45, p.2423.
41. **Magda M.T. et al.** — Phys. Rev., 1992, vol.C45, p.1209.
42. **Begemann-Blaich M. et al.** — Phys. Rev., 1992, vol.C45, p.677.
43. **Stuttge L. et al.** — Nucl. Phys., 1992, vol.A539, p.511.
44. **Khan H.A. et al.** — Kerntechnik, 1987, vol.49, p.236.
45. **Breitbach G.** — Diplomarbeit, Justus Liebig Universität, Giessen, 1983.
46. **Haag R.** — Dissertation, Justus Liebig Universität, Giessen, 1981.
47. **Rautenberg T.** — Diplomarbeit, Justus Liebig Universität, Giessen, 1903.
48. **Brandt R., Gottschalk P.A., Vater P.** — Nucl. Instr. and Meth., 1980, vol.173, p.111.
49. **Khan H.A., Rashid K., Akbar R. et al.** — Nucl. Instr. and Meth., 1980, vol.173, p.155.
50. **Fiedler G., Gottschalk P.A., Vater P. et al.** — Proceed. Symp. on Physics and Chemistry of Fission, Juelich, 1979, IAEA Vienna.

51. Haag R., Fiedler G., Rautenberg T. et al. — Proceed. 10th Intern. Conf. on SSNTD, Lyon, 1979. Suppl.2 to Nuclear Tracks, 1980, p.933.
52. Brandt R., Vater P., Grabez B. et al. — Proceed. Intern. Conf. on Nucl. Phys., LBL, 1980; LBL-11118, 1980, p.481.
53. Khan H.A., Beckmann R., Vater P. et al. — Proceed. 11th Intern. Conf. on SSNTD, Bristol, 1981. Suppl.3 to Nuclear Tracks, 1982, p.775.
54. Fiedler G., Haag R., Crombach P. et al. — Proceed. 11th Intern. Conf. on SSNTD, Bristol, 1981. Suppl.3 to Nuclear Tracks, 1982, p.779.
55. Khan H.A., Qureshi I.E., Westmeier W. et al. — Phys. Rev., 1985, vol.32, p.1551.
56. Fiedler G., Steinhäuser U., Rautenberg T. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1980, vol.173, p.85.
57. Khan H.A., Tress G., Vater P. et al. — Nucl. Tracks, 1980, vol.4, p.109.
58. Khan E.U. — Dissertation, Philipps Universität, Marburg, 1985.
59. Zamani M., Ralarosy J., Debeauvais M. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1986, vol.12, p.321.
60. Khan H.A. et al. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1986, vol.12, p.341.
61. Afarideh H. et al. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1988, vol.15, p.441.
62. Qureshi I.E. et al. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1988, vol.15, p.457.
63. Ahmad M. et al. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1988, vol.15, p.453.
64. Khan H.A. et al. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1988, vol.15, p.449.
65. R.L.Fleischer, Price P.B., Walker R.M. et al. — Phys. Rev., 1967, vol.156, p.353.
66. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. — Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat. Fys. Medd., 1963, vol.33.
67. Bohr N. — Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat. Fys. Medd., 1948, vol.18.
68. Tress G. — Diplomarbeit, Philipps Universität, Marburg, 1978.
69. Northcliffe L.C. — Schilling, Ann. Rev. Nucl. Sci., 1963, vol.13, p.67; Nuclear Data Tables, 1970, vol.A7, p.233.
70. Blok H., Kiely F.M., Pate B.D. — Nucl. Instr. and Meth., 1972, vol.100, p.403.
71. Natowitz J.B., Khodai-Joopari A., Alexander J.M. et al. — Phys. Rev., 1968, vol.169, p.993.
72. Heckman H.H., Perkins B.L., Simon W.G. et al. — Phys. Rev., 1960, vol.117, p.544.
73. Alexander J.M., Gazdik M.F. — Phys. Rev., 1960, vol.120, p.874.
74. Niday J.B. — Phys. Rev., 1961, vol.121, p.1471.
75. Hoshkin V.E., Sugihara T.T. — J. Inorg. Nucl. Chem., 1965, vol.27, p.943; 1965, vol.27, p.959.
76. Ormrod T.H., Duckworth H.E. — Can. J. Phys., 1963, vol.41, p.1424.
77. Ormrod J.H., MacDonald G.R., Duckworth H.E. — Can. J. Phys., 1965, vol.43, p.275.
78. Fastrup B., Hvelplund P., Sautter C.A. — Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat. Fys. Medd., 1966, vol.35, p.10.
79. Davies J.A., Eriksson L., Jespersgaard P. — Nucl. Instr. and Meth., 1965, vol.38, p.245.
80. Schmidt K.H., Wohlfarth H., Clerc H.G. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1976, vol.134, p.157.
81. Tamain B., Chechik R., Fuchs H. et al. — Nucl. Phys., 1979, vol.A330, p.253.
82. Terrell J. — Phys. Rev., 1962, vol.127, p.880.
83. Gottschalk P.A., Vater P., Becker H.J. — Intern. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations IV, Hirschegg, Kleinwalsertal, 1978, AED-Conf. 78-007-28.
84. Saxena A.A., Dwivedi K.K., Fiedler G. — Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1988, vol.15, p.327.

85. Ghosh S., Saxena A., Dwivedi K.K. — *Rad. Eff. Defects in Solids*, 1990, vol.112, p.149.
86. Dwivedi K.K. — *Nucl. Tracks Radiat. Meas.*, 1991, vol.19, p.71.
87. Benton E.V., Henke R.P. — *Nucl. Instr. and Meth.*, 1969, vol.67, p.87.
88. Mukherji S., Srivastava B.K. — *Phys. Rev.*, 1974, vol.B9, p.3708.
89. Hubert F. et al. — *Suppl. Aux. Annal. de Physique*, 1980, vol.5, p.1.
90. e.g. see, Sautter C.A., Zimmermann E.J. — *Phys. Rev.*, 1965, vol.140, p.A490.
91. e.g. see, Nickel F., Marx D., Cuttner K. et al. — *Z. Phys.* 1978, vol.A288, p.125.
92. Vandenbosch R., Huizenga J.R. — *Nuclear Fission*, Academic Press N.Y., 1973.
93. Kiely F.M., Pate B.D. — *Nucl. Instr. and Meth.*, 1973, vol.109, p.355.
94. Milton C.D., Fraser J.S. — *Can. J. Phys.*, 1962, vol.40, p.1626.
95. Aras N.K., Menou M.P., Gordon G.E. — *Nucl. Phys.*, 1965, vol.69, p.337.
96. Khan H.A. et al. — *Nucl. Instr. and Meth.*, 1987, vol.B28, p.41.
97. Frahn W.E. — *Ann. Phys. (N.Y.)*, 1972, vol.72, p.524; *Nucl. Phys.*, 1978, vol.A302, p.267.
98. Blair J.S. — *Phys. Rev.*, 1954, vol.95, p.1218.
99. Thomas T.D. — *Phys. Rev.*, 1959, vol.116, p.703.
100. Myers W.D. — *Nucl. Phys.*, 1973, vol.A204, p.465.
101. Blocki J., Randrup J., Swiatecki W.J. et al. — *Ann. Phys.*, 1977, vol.105, p.427.
102. Birkelund J.R., Huizenga J.R., Freiesleben H. et al. — *Phys. Rev.*, 1976, vol.C13, p.133.
103. Hildenbrand K.D., Freiesleben H., Pühlhofer F. et al. — *Phys. Rev. Lett.*, 1977, vol.39, p.1065.
104. Frahn W.E. — *Nucl. Phys.*, 1978, vol.A302, p.301.
105. McIntyre J.A., Wang K.H., Becker L.C. — *Phys. Rev.*, 1960, vol.117, p.1337.
106. Broglia R.A., Winther A. — *Heavy Ion Reactions*, vol.1, Elastic and Inelastic Reactions. Benjamin-Cummings (London), 1981.
107. Zupancic C. — *Rev. of Mod. Phys.*, 1965, vol.37, p.330.
108. Hanappe F., Ngo C., Peter J. et al. — *Proceed. of IAEA Symposium on Physics and Chemistry of Fission*, Rochester, N.Y., 1973, vol.11, p.289.
109. Viola V.E. Jr. — *Nucl. Data Sect.*, 1966, vol.A1, p.391.
110. Glässel P., Harrach D.V., Civelekoglu Y. et al. — *Phys. Rev. Lett.*, 1979, vol.43, p.1483.
111. Harrach D.V., Glässel P., Civelekoglu Y. et al. — *Phys. Rev. Lett.*, 1979, vol.42, p.1728.
112. Kroeger H., Scheid W. — *Nucl. Phys.*, 1980, vol.A346, p.216.
113. Kratz J.V., Norris A.E., Seaborg G.T. — *Phys. Rev. Lett.*, 1974, vol.33, p.502.
114. Lucas R., Poitou J., Kratz J.V. et al. — *Z. Phys.*, 1979, vol.A290, p.327.
115. Gupta R.K. — *Phys. Rev.*, 1980, vol.C21, p.1278.
116. Galin J. — *Proceedings of the European Conference on Physics with Heavy Ion*. Can. J. Phys. Paris, Suppl., 1976, vol.C5, p.83.
117. Otto R.J., Seaborg G.T., Fowler M.M. — *Phys. Rev.*, 1978, vol.C17, p.1071.
118. Schürmann B. et al. — *Z. Phys.*, 1978, vol.A286, p.263.
119. Schaedel M., Kratz J.V., Ahrens H. et al. — *Phys. Rev. Lett.*, 1978, vol.41, p.469.
120. Freiesleben H., Hildenbrand K.D., Pühlhofer F. et al. — *Z. Phys.*, 1979, vol.A292, p.171.
121. Businaro U.L., Gallone Z. — *Nuov. Cim.*, 1955, vol.1, p.629, p.1277.
122. Nix J.R. — *Nucl. Phys.*, 1969, vol.A130, p.241.
123. Cohen S., Plasil F., Swiatecki W.J. — *Ann. Phys. (N.Y.)*, 1974, vol.82, p.557.

ГАМИЛЬТОНОВ ПОДХОД В ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД СО СПОНТАННО НАРУШЕННОЙ СИММЕТРИЕЙ

А.А.Исаев, М.Ю.Ковалевский, С.В.Пелетминский

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина

На основе гамильтонова формализма рассмотрена динамика конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией. Сформулирован метод получения скобок Пуассона динамических переменных, основанный на задании кинематической части лагранжиана и интерпретации внеинтегральных членов в вариации действия как генераторов канонических преобразований. Изучены дифференциальные законы сохранения, связанные с различными симметриями гамильтониана системы. Рассмотрены примеры канонических преобразований, играющих важную физическую роль, и получены их генераторы. Установлена связь гамильтонова и лагранжева подходов. В качестве конкретных физических объектов в обзоре изучена динамика жидких и квантовых кристаллов, многоподрешеточных магнетиков, сверхтекучих жидкостей (^4He , $^3\text{He-B}$), нематических эластомеров.

On the base of Hamiltonian formalism dynamics of condensed media with spontaneously broken symmetry is considered. The method for derivation of dynamic variables' Poisson brackets, based on the setting the Lagrangian kinematic part and interpretation of outside integral terms in the action variation as generators of canonical transformations, is formulated. Differential conservation laws, connected with different system Hamiltonian symmetry properties, have been studied. Examples of canonical transformations playing important physical role are considered and their generators are received. The connection between Hamiltonian and Lagrangian approaches is found. In the review as examples of specific physical objects the dynamics of liquid and quantum crystals, multisublattice magnetics, superfluid liquids (^4He , $^3\text{He-B}$), nematic elastomers is studied.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время гамильтонов формализм является эффективным методом построения нелинейных динамических уравнений для различных физических систем. Гамильтонов подход сыграл важнейшую роль при создании квантовой механики [1,2] и квантовой теории поля [3—5]. Он также нашел широкое применение в теории точно интегрируемых систем [6—8] и при построении теории возмущений для слабозамушенных нелинейных уравнений, когда в качестве нулевого приближения фигурирует точно интегрируемая задача [9]. В последнем случае эффективно используется метод усреднения, предложенный в работах [10,11], а также идея об иерархии пространственно-временных масштабов, которые лежат в основе современной кинетической теории [12]. Гамильтонов подход позволяет исследовать динамику как классических конденсированных сред, так и макроскопических квантовых объектов. Для классических конденсированных сред гамильтонов формализм разрабатывается для нормальных жидкостей [13,14], твердых тел [15—17], жидких кристаллов [18—20]. Указанный подход для квантовых конденсированных сред применялся к сверхтекучим жидкостям [21—24], магнетикам [25—27], квантовым кристаллам [28].

Основополагающую роль в гамильтоновом подходе играет определение скобок Пуассона (СП) динамических переменных. В случае конденсированных сред СП динамических переменных, в отличие от обычных механических систем, имеют нетривиальную структуру. Для нормальных физических систем сокращенное описание на гидродинамическом этапе эволюции строится на основе плотностей аддитивных интегралов движения, СП которых хорошо известны. При описании систем со спонтанно нарушенной симметрией вводятся дополнительные гидродинамические параметры, которые не связаны с законами сохранения, а обусловлены указанной нарушенной симметрией. Построение СП для этих переменных (как с плотностями аддитивных интегралов движения, так и между собой) и представляет основную проблему.

В [16] СП выводились на основе рассмотрения вариаций переменных при преобразованиях группы, соответствующих нарушенной симметрии системы. В ряде случаев СП выводились путем замены коммутаторов, которые вычислялись в квантовой механике, на СП. В предлагаемом подходе основополагающую роль при получении СП играет структура кинематической части действия (или лагранжиана); кинематическая часть определяется как часть, содержащая линейным и однородным образом временные производные от динамических переменных. Мы показываем, как могут быть получены СП для переменных различных физических систем, исходя из преобразований, оставляющих инвариантной кинематическую часть действия. При этом внеинтегральные члены в вариации действия интер-

претируются как генераторы этих преобразований. Существенным моментом развиваемого подхода является введение дополнительных гидродинамических переменных в терминах величин, сопряженных плотностям аддитивных интегралов движения. Для выяснения структуры кинематической части лагранжиана важную роль играет построение операторов трансляций и их плотностей для различных физических полей, фигурирующих в действии.

На основе развитого подхода рассмотрены классические сплошные среды (теория упругости, гидродинамика, ряд фаз жидких кристаллов, нематические эластомеры), а также магнитоупорядоченные и сверхтекучие системы [29].

В случае классических сплошных сред, установив для них алгебру СП динамических переменных, мы всякий раз для описания рассматриваемого физического состояния выделяем из этой общей алгебры замкнутые подалгебры переменных данной системы. Замкнутая динамика получается при этом в предположении, что переменные, не входящие в подалгебру, являются циклическими (гамильтониан H не зависит от таких переменных). Это позволяет на единой основе проследить, как могут быть получены известные уравнения теории упругости, гидродинамики, динамики жидкокристаллических фаз из общих уравнений динамики сплошных сред.

При изучении магнитоупорядоченных систем найдена общая алгебра СП, соответствующая магнетике с полным нарушением симметрии относительно спиновых вращений, и в качестве подалгебр выделены СП переменных, описывающих одноосный спиральный магнетик и антиферромагнетик. Также показано, как, исходя из выражения для кинематической части действия в терминах обобщенных координат и импульсов, могут быть получены СП для переменных квадрупольного магнетика. Далее рассмотрена динамика магнитоупругих сред, в число динамических переменных которых входят как переменные, соответствующие сплошным средам, так и переменные, соответствующие магнетизму.

При изучении систем с нарушенной фазовой инвариантностью нами рассмотрены случаи квантового кристалла, сверхтекучих фаз ^4He , $^3\text{He-B}$, а также произведен учет спиновых степеней свободы в уравнениях динамики квантового кристалла (квантовые спиновые кристаллы).

Подчеркнем, что включение дополнительных термодинамических параметров, не связанных с законами сохранения (параметров порядка), в полную систему нелинейных гидродинамических уравнений не является тривиальной задачей. Для рассмотрения этих задач мы используем гамильтонов подход, который позволяет без потери физической ясности последовательно получать бездиссипативные уравнения гидродинамики, автоматически учитывающие требуемые свойства симметрии гамильтониана, а

также находить плотности потоков аддитивных интегралов движения в терминах плотностей аддитивных интегралов движения. Остановимся теперь на основах развиваемого формализма.

1. ОСНОВЫ ФОРМАЛИЗМА

Представим лагранжиан системы в виде

$$L = L_k(\varphi, \dot{\varphi}) - H(\varphi) \equiv \int d^3x F_\alpha(x; \varphi) \dot{\varphi}_\alpha(x) - H(\varphi), \quad (1.1)$$

где $L_k(\varphi, \dot{\varphi})$ — кинематическая часть лагранжиана, $H(\varphi)$ — гамильтониан, $F_\alpha(x; \varphi(x'))$ — некоторый функционал динамических переменных $\varphi_\alpha(x)$. Рассмотрим бесконечно малые преобразования полевых переменных $\varphi_\alpha(x)$:

$$\varphi_\alpha(x, t) \rightarrow \varphi'_\alpha(x, t) = \varphi_\alpha(x, t) + \delta\varphi_\alpha(x, t) \quad (1.2)$$

(мы не будем далее явно выписывать аргумент t в динамических переменных и их вариациях). Вариация действия $W = \int_{t_1}^{t_2} L dt$, обусловленная преобразованиями (1.2), имеет вид

$$\begin{aligned} \delta W = & G(t_2, \varphi) - G(t_1, \varphi) + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \delta\varphi_\beta(x') \left(\int d^3x J_{\beta\alpha}(x, x'; \varphi) \dot{\varphi}_\alpha(x) - \frac{\delta H}{\delta\varphi_\beta(x')} \right), \end{aligned} \quad (1.3)$$

где

$$G(t, \varphi) = \int d^3x F_\alpha(x, \varphi) \delta\varphi_\alpha(x); \quad J_{\alpha\beta}(x, x'; \varphi) = \frac{\delta F_\beta(x'; \varphi)}{\delta\varphi_\alpha(x)} - \frac{\delta F_\alpha(x; \varphi)}{\delta\varphi_\beta(x')}.$$

Из принципа стационарного действия следует, что уравнения для компонент поля $\varphi_\alpha(x)$ имеют вид

$$\dot{\varphi}_\alpha(x) = \int d^3x' J_{\alpha\beta}^{-1}(x, x'; \varphi) \frac{\delta H}{\delta\varphi_\beta(x')}. \quad (1.4)$$

Здесь обратная матрица $J_{\alpha\beta}^{-1}(x, x')$ определена равенством

$$\int d^3x'' J_{\alpha\nu}(x, x'') J_{\nu\beta}^{-1}(x'', x') = \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x').$$

В силу антисимметрии $J_{\alpha\beta}(x, x')$ относительно перестановки $\alpha \leftrightarrow \beta$, $x \leftrightarrow x'$ матрица $J_{\alpha\beta}(x, x')$ является невырожденной только в случае четного числа переменных $\varphi_\alpha(x)$.

Определим СП произвольных функционалов A и B динамических переменных $\varphi_\alpha(x)$ равенством

$$\{A, B\} = \int d^3x d^3x' \frac{\delta A}{\delta \varphi_\alpha(x)} J_{\alpha\beta}^{-1}(x, x'; \varphi) \frac{\delta B}{\delta \varphi_\beta(x')}. \quad (1.5)$$

Тогда уравнения движения (1.4) примут гамильтонов вид

$$\dot{\varphi}_\alpha(x) = \{\varphi_\alpha(x), H\}. \quad (1.6)$$

Из определения (1.5), с учетом (1.3), следует, что СП произвольных функционалов A и B удовлетворяют соотношениям

$$\{A, B\} = -\{B, A\}, \{AB, C\} = A\{B, C\} + B\{A, C\}$$

и тождеству Якоби

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0.$$

Последнее справедливо в силу равенства

$$\frac{\delta J_{\alpha\beta}(\varphi)}{\delta \varphi_\gamma(x)} + \frac{\delta J_{\beta\gamma}(\varphi)}{\delta \varphi_\alpha(x)} + \frac{\delta J_{\gamma\alpha}(\varphi)}{\delta \varphi_\beta(x)} = 0.$$

Отметим, что гамильтонова механика в произвольных переменных для систем с конечным числом степеней свободы изучалась Паули [30] (см. также [31]), где, в частности, были получены СП, аналогичные (1.5).

Рассмотрим конечные преобразования

$$\varphi_\alpha(x) \rightarrow \varphi'_\alpha(x) = \varphi'_\alpha(x; \varphi(x')). \quad (1.7)$$

Преобразования (1.7) называются каноническими, если выполнено условие

$$\int d^3x F_\alpha(x; \varphi) \delta \varphi_\alpha(x) - \int d^3x F_\alpha(x; \varphi') \delta \varphi'_\alpha(x) = \delta Q(\varphi). \quad (1.8)$$

Здесь $Q(\varphi)$ — некоторый функционал динамических переменных φ_α , зависящий от структуры канонических преобразований. Так как соотношение (1.8) эквивалентно равенству

$$\frac{\delta Q}{\delta \varphi_\alpha(x)} = F_\alpha(x, \varphi) - \int d^3x_1 F_\lambda(x_1, \varphi) \frac{\delta \varphi'_\lambda(x_1)}{\delta \varphi_\alpha(x)}, \quad (1.9)$$

то, с учетом формулы

$$\frac{\delta^2 Q}{\delta \varphi_\alpha(x) \delta \varphi_\beta(x')} = \frac{\delta^2 Q}{\delta \varphi_\beta(x') \delta \varphi_\alpha(x)},$$

представим условие каноничности в виде

$$J_{\alpha\beta}(x, x'; \varphi) = \int d^3 x_1 d^3 x_2 \frac{\delta \varphi'_\lambda(x_1)}{\delta \varphi_\alpha(x)} \frac{\delta \varphi'_\nu(x_2)}{\delta \varphi_\beta(x')} J_{\lambda\nu}(x_1, x_2; \varphi'). \quad (1.10)$$

В случае бесконечно малых преобразований

$$\varphi_\alpha(x) \rightarrow \varphi'_\alpha(x) = \varphi_\alpha(x) + \delta \varphi_\alpha(x; \varphi(x'))$$

соотношение (1.9) принимает вид

$$\int d^3 x' J_{\alpha\beta}(x, x'; \varphi) \delta \varphi_\beta(x') = \frac{\delta G}{\delta \varphi_\alpha(x)}, \quad G = \delta Q + \int d^3 x F_\alpha(x, \varphi) \delta \varphi_\alpha(x),$$

или, с учетом (1.5),

$$\delta \varphi_\alpha(x) = \{ \varphi_\alpha(x), G \}, \quad (1.11)$$

где G — генератор бесконечно малых канонических преобразований. Нетрудно проверить, что СП (1.5) инвариантны относительно канонических преобразований (1.7), (1.10).

Рассмотрим теперь преобразования (1.7), оставляющие инвариантной кинематическую часть лагранжиана. Такие преобразования удовлетворяют соотношению

$$F_\alpha(x; \varphi) = \int d^3 x' F_\beta(x'; \varphi') \frac{\delta \varphi'_\beta(x'; \varphi)}{\delta \varphi_\alpha(x)},$$

и, согласно (1.9), являются каноническими с $Q(\varphi) = \text{const}$. Для бесконечно малых преобразований последнее равенство запишется в виде (1.11) с генератором $G = \int d^3 x F_\alpha(x; \varphi) \delta \varphi_\alpha(x)$, определяемым формулой (1.3). Интерпретация внеинтегральных членов в вариации действия как генераторов бесконечно малых преобразований для квантового случая впервые была приведена Швингером [3].

Расширение рассмотренного класса вариаций может быть достигнуто прибавлением к лагранжиану полной производной по времени от произвольного функционала $\chi(\varphi)$. Соответствующее уравнение для расширенного класса вариаций имеет вид

$$\int d^3 x' J_{\alpha\beta}(x, x', \varphi) \delta \varphi_\beta(x') = \frac{\delta}{\delta \varphi_\alpha(x)} \left(G + \int d^3 x' \frac{\delta \chi(\varphi)}{\delta \varphi_\beta(x')} \delta \varphi_\beta(x') \right).$$

Для конечных преобразований (1.7) условие инвариантности кинематической части лагранжиана с учетом неопределенности в выборе L :

$$L \rightarrow L' = L + \int d^3x \frac{\delta\chi(\varphi)}{\delta\varphi_\alpha(x)} \dot{\varphi}_\alpha(x)$$

запишется в виде

$$F_\alpha(x; \varphi) = \int d^3x' F_\beta(x'; \varphi) \frac{\delta\varphi'_\beta(x'; \varphi)}{\delta\varphi_\alpha(x)} + \frac{\delta\chi(\varphi')}{\delta\varphi_\alpha(x)} - \frac{\delta\chi(\varphi)}{\delta\varphi_\alpha(x)}. \quad (1.12)$$

Преобразования (1.7), (1.12) являются каноническими с $Q = \chi(\varphi') - \chi(\varphi)$.

В рамках гамильтонова подхода могут быть просто сформулированы дифференциальные законы сохранения, связанные с различными свойствами симметрии гамильтониана. Уравнения движения для плотности произвольной физической величины $A = \int d^3x a(x)$ может быть представлено в виде

$$\dot{a}(x) = \{a(x), H\} \equiv \{A, \varepsilon(x)\} - \nabla_k a_k(x), \quad (1.13)$$

где

$$a_k(x) = \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{a(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x')\}.$$

Если величина A есть генератор G группы симметрии гамильтониана, то уравнение (1.13) имеет вид дифференциального закона сохранения (см. ниже). При этом сам генератор G не зависит от времени. Действительно,

$$\dot{G} = \{G, H\} = -\{H, G\} = -\delta H, \quad (1.14)$$

где δH — вариация гамильтониана, обусловленная преобразованиями (1.11). Отсюда, если $\delta H = 0$, то и $\dot{G} = 0$.

Полагая в формуле (1.13) $a(x) = \rho(x)$, где $\rho(x)$ — плотность вещества, и считая, что

$$\{M, \varepsilon(x)\} = 0, \quad M \equiv \int d^3x \rho(x),$$

получим дифференциальный закон сохранения плотности массы:

$$\dot{\rho}(x) = -\nabla_k j_k(x), \quad j_k(x) = \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{\rho(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x')\}. \quad (1.15)$$

Здесь j_k — плотность потока массы.

Если $a(x) = \pi_i(x)$, где $\pi_i(x)$ — плотность импульса, и плотность энергии удовлетворяет условию трансляционной инвариантности:

$$\{P_i(x), \varepsilon(x)\} = \nabla_i \varepsilon(x), \quad P_i \equiv \int d^3x \pi_i(x),$$

то из (1.13) получим дифференциальный закон сохранения импульса:

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_i(x) &= -\nabla_k t_{ik}(x), \\ t_{ik}(x) &= -\varepsilon(x) \delta_{ik} + \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{ \pi_i(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x') \}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Здесь t_{ik} — тензор натяжений.

Положим в (1.13) $a(x) = s_\alpha(x)$, где $s_\alpha(x)$ — плотность спина. Если выполняется условие вращательной инвариантности плотности энергии относительно спиновых вращений

$$\{S_\alpha, \varepsilon(x)\} = 0, \quad S_\alpha = \int d^3x s_\alpha(x),$$

то формула (1.13) приводит к закону сохранения:

$$\begin{aligned} \dot{s}_\alpha(x) &= -\nabla_k j_{\alpha k}(x), \\ j_{\alpha k}(x) &= \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{ s_\alpha(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x') \}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Здесь $j_{\alpha k}$ — плотность потока спина.

При $a(x) = \varepsilon(x)$ из (1.13) получим дифференциальный закон сохранения энергии:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}(x) &= -\nabla_k q_k(x), \\ q_k(x) &= \frac{1}{2} \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{ \varepsilon(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x') \}, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где q_k — плотность потока энергии.

2. ДИНАМИКА КЛАССИЧЕСКИХ СПЛОШНЫХ СРЕД

Перейдем к рассмотрению динамики сплошных сред [32]. В терминах лагранжевых переменных ξ_i положение частицы среды характеризуется функциями $x_k(\xi, t)$ (лагранжевы координаты ξ_i можно рассматривать как ко-

ординаты частицы в начальном положении, соответствующем недеформированному состоянию). Запишем лагранжиан системы в виде

$$L = L_k - \int d^3\xi \underline{\varepsilon}(\xi), \quad (2.1)$$

где $\underline{\varepsilon}(\xi) = \varepsilon\left(\pi(\xi); \frac{\partial x}{\partial \xi}\right)$ — плотность энергии, являющаяся функционалом производных $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$, L_k — кинематическая часть лагранжиана:

$$L_k = \int d^3\xi \underline{\mathcal{L}}_k(\xi), \quad \underline{\mathcal{L}}_k(\xi) = \underline{\pi}_i(\xi) \dot{x}_i(\xi) \quad (2.2)$$

и $\underline{\pi}_i(\xi)$ — плотность импульса в лагранжевых переменных.

Перейдем в выражении (2.2) для плотности кинематической части $\underline{\mathcal{L}}_k(\xi)$ к эйлеровым переменным x_k . Для этого введем вектор смещения частиц сплошной среды:

$$x_i(t) = \xi_i + u_i(x, t). \quad (2.3)$$

Замечая, что

$$b_{ij}(x) \dot{x}_j = \dot{u}_i(x), \quad b_{ij}(x) = \delta_{ij} - \nabla_j u_i(x), \quad (2.4)$$

представим плотность кинематической части лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = \pi_i(x) b_{ij}^{-1}(x) \dot{u}_j(x), \quad (2.5)$$

где $\pi_i(x) = \left| \frac{\partial \xi}{\partial x} \right| \pi_i(\xi)$ — плотность импульса в эйлеровых переменных. С использованием данной кинематической части могут быть получены СП для переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$. Нам, кроме того, для формулировки уравнения адиабатичности понадобятся СП, содержащие плотность энтропии $\sigma(x)$. Для нахождения этих СП перепишем кинематическую часть лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = p_j(x) \dot{u}_j(x) - \sigma(x) \dot{\psi}(x), \quad (2.6)$$

где

$$p_j(x) = (\pi_i(x) - \sigma(x) \nabla_i \psi(x)) b_{ij}^{-1}(x).$$

Переменная $\psi(x)$, которая является сопряженной к переменной $\sigma(x)$, введена в кинематическую часть лагранжиана формально и при написании уравнений движения будет считаться циклической (гамильтониан H не зависит от ψ). Происхождение второго слагаемого в формуле (2.6) достаточно прозрачно, в то время как структура величины p_j требует пояс-

нения. Заметим, что плотность импульса $\pi_i(x)$ в (2.5) связана с трансляциями в пространстве переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$. При введении новых переменных $\sigma(x)$, $\psi(x)$ плотность импульса $\pi_i(x)$ связана уже с трансляциями в полном пространстве переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$, $\sigma(x)$, $\psi(x)$ и может быть представлена в виде

$$\pi_i(x) = \pi_i^*(x) + \pi_i^\sigma(x),$$

где $\pi_i^*(x)$ — плотность импульса, связанная с трансляциями в пространстве только переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$, а $\pi_i^\sigma(x)$ — с трансляциями в пространстве $\sigma(x)$, $\psi(x)$. Величина $\pi_i^\sigma(x)$, как будет видно далее, равна

$$\pi_i^\sigma(x) = \sigma(x) \nabla_i \psi(x)$$

(эту формулу легко предугадать, заметив, что величины $\psi(x)$ и $-\sigma(x)$ являются обобщенными координатами и импульсами). Поэтому плотность импульса $\pi_i^*(x)$, связанная с трансляциями в пространстве переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$, имеет вид

$$\pi_i^*(x) = \pi_i(x) - \sigma(x) \nabla_i \psi(x),$$

откуда и следует структура величины p_j в (2.6). Приведенные соображения носят только наводящий характер и не являются строгими. Отметим, что, в соответствии с общим формализмом, для нахождения СП основных динамических переменных необходимо было бы найти обратную матрицу $J_{\alpha\beta}^{-1}$. Однако мы поступим иначе и будем придерживаться следующей схемы. Прежде всего, найдем какие-либо бесконечно малые канонические преобразования $\delta\varphi_\alpha(x; \varphi)$, оставляющие инвариантной кинематическую часть лагранжиана. Зная, с одной стороны, их явный вид, а с другой стороны, представляя $\delta\varphi_\alpha$ в виде (1.11)

$$\delta\varphi_\alpha(x) = \{\varphi_\alpha(x), G\}$$

с генератором

$$G = \int d^3x F_\alpha(x, \varphi) \delta\varphi_\alpha(x)$$

(мы придерживаемся здесь общих обозначений и для удобства еще раз выписываем формулы первого раздела), нетрудно, сравнивая левую и правую части формулы (1.11), найти СП различных динамических переменных.

В частности, легко видеть, что вариации

$$\delta p_i(x) = \delta\sigma(x) = 0, \quad \delta u_i(x) = f_i(x), \quad \delta\psi(x) = \chi(x) \quad (2.7)$$

(где функции $f_i(x)$, $\chi(x)$ не зависят от $u_i(x)$, $p_i(x)$, $\sigma(x)$, $\psi(x)$) оставляют инвариантной кинематическую часть лагранжиана (2.6). Представляя их в виде

$$\begin{aligned}\delta p_i(x) &= \{p_i(x), G\}, \quad \delta u_i(x) = \{u_i(x), G\}, \\ \delta \sigma(x) &= \{\sigma(x), G\}, \quad \delta \psi(x) = \{\psi(x), G\},\end{aligned}\quad (2.8)$$

где G — генератор преобразований (2.7), равный

$$G = \int d^3x (p_i(x) f_i(x) - \sigma(x) \chi(x)), \quad (2.9)$$

из (2.8), (2.9) получим СП:

$$\{u_i(x), p_j(x')\} = \delta_{ij} \delta(x - x'), \quad \{\sigma(x), \psi(x')\} = \delta(x - x') \quad (2.10)$$

(мы выписываем только нетривиальные СП). Теперь могут быть найдены СП физических переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$, $\sigma(x)$, $\psi(x)$. Как легко убедиться, из формул

$$\{\pi_i^*(x), \psi(x')\} = \{\pi_i^*(x), \sigma(x')\} = 0,$$

где

$$\pi_i^*(x) \equiv \pi_i(x) - \sigma(x) \nabla_i \psi(x) = p_j(x) b_{ji}(x),$$

следуют формулы

$$\{\pi_i(x), \sigma(x')\} = -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \psi(x')\} = \nabla_i \psi(x) \delta(x - x'). \quad (2.11)$$

С учетом (2.10), для величин $\pi_i^\sigma(x) \equiv \sigma(x) \nabla_i \psi(x)$ имеем

$$\{\pi_i^\sigma(x), \pi_k^\sigma(x')\} = \pi_k^\sigma(x) \nabla_i' \delta(x - x') - \pi_i^\sigma(x') \nabla_k \delta(x - x').$$

Отсюда и из формулы

$$\{p_i(x), p_k(x')\} = 0$$

получим

$$\{\pi_i(x), \pi_k(x')\} = \pi_k(x) \nabla_i' \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'). \quad (2.12)$$

Первое из соотношений (2.10) приводит к равенству

$$\{u_i(x), \pi_k(x')\} = b_{ik}(x) \delta(x - x'). \quad (2.13)$$

Формулы (2.10)—(2.13) определяют систему нетривиальных СП континуума:

$$\begin{aligned}
\{\sigma(x), \psi(x')\} &= \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \sigma(x')\} = -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \\
\{\pi_i(x), \psi(x')\} &= \nabla_i \psi(x) \delta(x - x'), \quad \{u_i(x), \pi_k(x')\} = b_{ik}(x) \delta(x - x'), \\
\{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla_i' \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x').
\end{aligned} \quad (2.14)$$

Учтем теперь, что, если $\tilde{\rho}$ — плотность вещества, отнесенная к единице недеформированного объема, то истинная плотность ρ определяется формулой

$$\rho = \tilde{\rho} \det(b_{ij}). \quad (2.15)$$

Принимая во внимание (2.13), (2.15), найдем СП переменных $\rho(x)$, $\pi_i(x)$:

$$\{\pi_i(x), \rho(x')\} = \rho(x) \nabla_i' \delta(x - x'). \quad (2.16)$$

Перейдем к уравнениям динамики сплошной среды. Гамильтониан рассматриваемой системы в общем случае имеет вид

$$H = \int d^3x \varepsilon(x), \quad \varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \pi_i(x'), b_{ij}(x')).$$

Здесь $\varepsilon(x)$ — плотность энергии в эйлеровых переменных, являющаяся функционалом величин $\sigma(x)$, $\pi_i(x)$, $b_{ij}(x)$ (переменная ψ — циклическая) и связанная с плотностью энергии в лагранжевых переменных формулой

$$\varepsilon(x) = \left| \frac{\partial \xi}{\partial x} \right| \varepsilon(\xi).$$

Отметим, что в силу свойства инвариантности $\varepsilon(x)$ относительно трансляций лагранжевых координат (которое будет предполагаться в дальнейшем, см. (3.12), (3.14)) плотность энергии $\varepsilon(x)$ зависит не от самих величин $u_i(x)$, а только от их производных $\partial u_i / \partial x_j$, или, что то же самое, от величин $b_{ij}(x)$. Поэтому удобно в качестве динамических переменных, наряду с остальными, выбрать непосредственно величины $b_{ij}(x)$. Их ненулевая СП с плотностью импульса $\pi_i(x)$ равна

$$\{b_{ij}(x), \pi_k(x')\} = -b_{ik}(x') \nabla_j \delta(x - x'). \quad (2.17)$$

Используя СП (2.14), (2.17), получим уравнения динамики сплошной среды в виде

$$\dot{\sigma}(x) = -\nabla_i \left(\sigma(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_i(x)} \right), \quad \dot{b}_{ik}(x) = -\nabla_k \left(b_{ij}(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_j(x)} \right),$$

$$\begin{aligned}\dot{\pi}_i(x) = & -\pi_j(x)\nabla_i\frac{\delta H}{\delta\pi_j(x)} - \nabla_j\left(\pi_i(x)\frac{\delta H}{\delta\pi_j(x)}\right) - \\ & - b_{ki}(x)\nabla_j\frac{\delta H}{\delta b_{kj}(x)} - \sigma(x)\nabla_i\frac{\delta H}{\delta\sigma(x)}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Как правило, в теории сплошных сред вместо второго уравнения в (2.18) записывают уравнение непосредственно для вектора смещения

$$\dot{u}_i(x) = -b_{ij}(x)\frac{\delta H}{\delta\pi_j(x)}.$$

Если предположить, что гамильтониан системы обладает свойством галилеевской инвариантности

$$H = H_0 + V(b(x')), \quad H_0 = \int d^3x \frac{\pi^2(x)}{2\rho(x)}, \quad (2.19)$$

то из (2.18) получим

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}(x) = & -\nabla_i\left(\sigma(x)\frac{\pi_i(x)}{\rho(x)}\right), \quad \dot{b}_{ik}(x) = -\nabla_k\left(b_{ij}(x)\frac{\pi_j(x)}{\rho(x)}\right), \\ \dot{\pi}_i(x) = & -\nabla_j\frac{\pi_i(x)\pi_j(x)}{\rho(x)} - b_{ki}(x)\nabla_j\frac{\delta V}{\delta b_{kj}(x)} - \sigma(x)\nabla_i\frac{\delta V}{\delta\sigma(x)}.\end{aligned}\quad (2.20)$$

Если плотность энергии взаимодействия $v(x)$ ($V = \int d^3x v(x)$) зависит от величин $b(x)$, $\sigma(x)$ только локально: $v(x) = v(b(x), \sigma(x))$, то для последнего из уравнений (2.20) имеем

$$\dot{\pi}_i = -\nabla_j t_{ij}, \quad t_{ij} = \frac{\pi_i\pi_j}{\rho} + b_{ki}\frac{\partial v}{\partial b_{kj}} + \left(-v + \sigma\frac{\partial v}{\partial\sigma}\right)\delta_{ij}. \quad (2.21)$$

В дальнейшем нам понадобится свойство инвариантности гамильтониана сплошной среды относительно вращений, которое мы запишем в виде

$$\{\mathcal{L}_i, \varepsilon(x)\} = \varepsilon_{ikl}x_k\frac{\partial\varepsilon(x)}{\partial x_l}, \quad \mathcal{L}_i = \int d^3x \varepsilon_{ikl}x_k\pi_l(x). \quad (2.22)$$

3. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Рассмотрим физическую интерпретацию некоторых преобразований, оставляющих инвариантной кинематическую часть лагранжиана. Пусть $x_i \rightarrow x'_i = x'_i(x)$ есть произвольное конечное преобразование, при котором вектор смещения преобразуется по закону

$$u_i(x, t) \rightarrow u_i'(x', t) = u_i(x, t) + x_i' - x_i \quad (3.1)$$

(закон (3.1) соответствует смещению частицы с лагранжевой координатой ξ_i из точки x_i в точку x_i'). Так как $\dot{u}_i'(x', t) = \dot{u}_i(x, t)$ (функции $x_i'(x)$ не зависят от t) и

$$b_{ij}'(x') = b_{is}(x) \frac{\partial x_s}{\partial x_j'}$$

(см. (2.4), (3.1)), то плотность кинематической части лагранжиана может быть записана в виде

$$\mathcal{L}_k = (\pi_i'(x') - \sigma'(x') \nabla_i' \psi'(x')) \left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| b_{ij}'^{-1}(x') \dot{u}_j'(x') - \sigma'(x') \left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| \dot{\psi}'(x'),$$

где мы определили закон преобразования плотности импульса

$$\pi_i(x) \rightarrow \pi_i'(x') = \left| \frac{\partial x}{\partial x'} \right| \frac{\partial x_s}{\partial x_i'} \pi_s(x) \quad (3.2)$$

и величин $\psi(x)$, $\sigma(x)$:

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x') = \psi(x), \quad \sigma(x) \rightarrow \sigma'(x') = \left| \frac{\partial x}{\partial x'} \right| \sigma(x) \quad (3.3)$$

таким образом, чтобы кинематическая часть L_k лагранжиана была инвариантна относительно конечных преобразований $x_i \rightarrow x_i' = x_i + \chi_i(x)$. В новых переменных для L_k имеем

$$\begin{aligned} L_k &= \int d^3 x' \{ p_j'(x') \dot{u}_j'(x') - \sigma'(x') \dot{\psi}'(x') \} = \\ &= \int d^3 x \{ p_j'(x) \dot{u}_j'(x) - \sigma'(x) \dot{\psi}'(x) \}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

где

$$p_j'(x) = (\pi_i'(x) - \sigma'(x) \nabla_i' \psi'(x)) b_{ij}'^{-1}(x).$$

Из (3.4) следует, что вариации динамических переменных $u_i(x)$, $\pi_i(x)$, $\psi(x)$, $\sigma(x)$ при бесконечно малых преобразованиях $x_i \rightarrow x_i' = x_i + \chi_i(x)$, $|\chi_i(x)| \ll 1$, должны быть определены равенствами

$$\delta f(x) = f'(x) - f(x), \quad f = \{u_i, \pi_i, \psi, \sigma\}, \quad (3.5)$$

Принимая во внимание (3.1)—(3.3), для вариаций (3.5) получим

$$\delta u_i(x) = b_{ij}(x) \chi_j(x), \quad \delta \psi(x) = -\chi_i(x) \nabla_i \psi(x), \quad \delta \sigma(x) = -\nabla_i (\chi_i(x) \sigma(x)),$$

$$\delta\pi_i(x) = -\nabla_j(\chi_j(x)\pi_i(x)) - \pi_j(x)\nabla_i\chi_j(x). \quad (3.6)$$

Эти вариации, оставляющие инвариантной кинематическую часть функции Лагранжа, являются, согласно общей теории, бесконечно малыми каноническими преобразованиями, генератор которых равен

$$G = \int d^3x \pi_i(x) b_{ij}^{-1}(x) \delta u_j(x) = \int d^3x \pi_i(x) \chi_i(x). \quad (3.7)$$

Рассмотрим преобразования (3.6) при $\chi_i = \text{const}$:

$$\begin{aligned} \delta u_i(x) &= \chi_i - \chi_k \nabla_k u_i(x), & \delta\psi(x) &= -\chi_i(x) \nabla_i \psi(x), \\ \delta\sigma(x) &= -\chi_i(x) \nabla_i \sigma(x), & \delta\pi_i(x) &= -\chi_j(x) \nabla_j \pi_i(x). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Вариации (3.8) соответствуют бесконечно малым трансляциям эйлеровых координат $\delta x_k = \chi_k$, $\delta\xi_k = 0$ (с учетом связи $\xi_i = x_i - u_i(x)$) с генератором

$$G = \chi_k P_k, \quad P_k = \int d^3x \pi_k(x). \quad (3.9)$$

Из (3.8), (3.9) найдем

$$\delta\epsilon(x) = \{\epsilon(x), G\} = -\chi_k \nabla_k \epsilon(x), \quad (3.10)$$

и, следовательно, $\delta H = \delta(\int dx \epsilon(x)) = 0$. Поэтому величина P_k , согласно (1.14), является интегралом движения и может интерпретироваться как импульс среды. С учетом (1.14), (3.10) дифференциальный закон сохранения для плотности импульса среды имеет вид (1.16). Если гамильтониан системы обладает галилеевской инвариантностью (см. (2.19)), то для тензора натяжений t_{ik} получим

$$\begin{aligned} t_{ik} &= t_{ik}^0 + t'_{ik}, & t_{ik}^0 &= \frac{\pi_i \pi_k}{\rho}, \\ t_{ik} &= -v(x) \delta_{ik} + \int d^3x' \chi'_k \int_0^1 d\lambda \{ \pi_i(x + \lambda x'), v(x - (1-\lambda)x') \}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Рассмотрим теперь бесконечно малые преобразования (2.7) с $f_i = \text{const}$, $\chi = 0$:

$$\delta u_i(x) = f_i, \quad \delta\psi(x) = 0, \quad \delta\pi_i(x) = 0, \quad \delta\sigma(x) = 0. \quad (3.12)$$

Так как $x_i = \xi_i + u_i(x)$, то этим преобразованиям отвечают трансляции лагранжевых координат $\delta\xi_i = -f_i$ ($\delta x_i = 0$). Генератор преобразований (3.12) имеет вид

$$G = f_i R_i, \quad R_i = \int d^3 x p_i(x), \quad p_i(x) = \pi_j^*(x) b_{ji}^{-1}(x). \quad (3.13)$$

Поскольку для преобразований (3.12)

$$\delta \varepsilon(x) = \{\varepsilon(x), G\} = 0,$$

и, следовательно, $\delta H = 0$, то величина R_i в выражении (3.13) для генератора трансляций лагранжевых координат является интегралом движения. Соответствующий дифференциальный закон сохранения имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{p}_i(x) &= -\nabla_k \tilde{\sigma}_{ik}(x), \\ \tilde{\sigma}_{ik}(x) &= \int d^3 x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{p_i(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x')\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Этот закон сохранения можно назвать законом сохранения обобщенного импульса (см. (2.6)). Покажем, что закон сохранения, связанный с трансляциями лагранжевых переменных, приводит к понятию импульса квазичастиц. Пусть среда содержит рассеивающий центр, импульс которого обозначим q_i . В этом случае величина $P_i = \int dx \pi_i(x)$ сохраняться не будет, а сохраняется величина $P_i + q_i$ (так как гамильтониан инвариантен относительно одновременного сдвига эйлеровых координат и координат частицы). Инвариантность же гамильтониана по отношению к трансляциям лагранжевых переменных будет формулироваться в прежнем виде. Поэтому величина R_i будет интегралом движения. Представим ее в виде

$$R_i = P_i - \mathcal{P}_i, \quad \mathcal{P}_i = \int d^3 x k_i(x), \quad k_i(x) = -\pi_j^*(x) \frac{\partial u_j(x)}{\partial \xi_i}.$$

Вследствие сохранения величины R_i приходим к соотношению $\dot{P}_i = \dot{\mathcal{P}}_i$, а так как $\dot{P}_i + \dot{q}_i = 0$, то $\dot{q}_i + \dot{\mathcal{P}}_i = 0$. Поэтому величина $\mathcal{P}_i$, квадратичная по динамическим переменным $u_i(x)$, $\pi_i^*(x)$, может интерпретироваться как импульс квазичастиц. (Можно показать, что при квантовании изучаемой механической системы величина $\mathcal{P}_i$ превращается в оператор импульса фоонов: $\mathcal{P}_i = \sum_{kj} k_i c_j^+(k) c_j(k)$). Таким образом, изменение импульса среды совпадает с изменением суммарного импульса квазичастиц. Замечая, что $p_i(x) = \pi_i^*(x) - k_i(x)$ и учитывая формулы (3.11), (3.14), находим

$$\dot{k}_i(x) = -\nabla_k \sigma_{ik}(x),$$

где плотность потока импульса квазичастиц σ_{ik} определяется соотношением

$$\sigma_{ik}(x) = -\varepsilon(x) \delta_{ik} + \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{k_i(x + \lambda x'), \varepsilon(x - (1 - \lambda)x')\}.$$

Из (3.8), (3.12) следует, что генератором преобразований трансляций

$$\delta u_i(x) = -\chi_k \nabla_k u_i(x), \quad \delta \pi_i(x) = -\chi_k \nabla_k \pi_i(x),$$

$$\delta \psi(x) = -\chi_k \nabla_k \psi(x), \quad \delta \sigma(x) = -\chi_k \nabla_k \sigma(x)$$

динамических переменных u_i , π_i , ψ , σ , рассматриваемых как полевые переменные, является величина $K = \chi_i \int d^3x k_i(x)$. Поэтому импульс квазичастиц совпадает с полевым импульсом.

4. УПРУГОСТЬ. ГИДРОДИНАМИКА

Рассмотрим теперь, как могут быть получены уравнения теории упругости из общих динамических уравнений (2.20), (2.21) сплошной среды. Предположение об инвариантности гамильтониана системы относительно произвольных вращений решетки (см. (2.22)) приводит к тому, что плотность энергии взаимодействия будет зависеть от вполне определенных комбинаций матрицы b_{ij} . Поскольку при вращении тела преобразуются координаты x_k , соответствующие положения частиц среды в деформированном состоянии, а лагранжевы координаты ξ_k остаются неизменными, то в качестве инвариантов могут быть выбраны величины

$$K_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_k} = b_{ik} b_{jk}.$$

Таким образом, $v(x) = v(K_{ij}(x))$, и, как следствие общих уравнений (2.20), (2.21), получим уравнения движения в случае упругой среды:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= -\nabla_i \left(\sigma \frac{\pi_i}{\rho} \right), \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\pi_j}{\rho} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_j t_{ij}, \quad t_{ij} = \frac{\pi_i \pi_j}{\rho} + 2b_{mi} b_{lj} \frac{\partial v}{\partial K_{ml}} + \left(-v + \sigma \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Если плотность энергии взаимодействия зависит только от плотности $\rho(x)$, которая связана с инвариантами K_{ij} соотношением

$$\rho = \tilde{\rho} \det(b_{ij}) = \tilde{\rho} \sqrt{\det(K_{ij})}$$

($\tilde{\rho}$ — плотность недеформированной среды), то из уравнений движения упругой среды получим обычные уравнения идеальной гидродинамики

$$\begin{aligned} \dot{\rho} + \nabla_k \pi_k &= 0, \quad \dot{\sigma} = -\nabla_i \left(\sigma \frac{\pi_i}{\rho} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_k t_{ik}, \quad t_{ik} = \frac{\pi_i \pi_k}{\rho} + p \delta_{ik}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где

$$p = \rho \frac{\partial v}{\partial \rho} + \sigma \frac{\partial v}{\partial \sigma} - v. \quad (4.3)$$

Уравнения (4.2) могут быть также непосредственно выведены на основе алгебры СП переменных ρ , π_i , σ (см. (2.12), (2.16) и первую формулу в (2.11)), которая является подалгеброй алгебры (2.14) переменных сплошной среды. Для получения (4.3) заметим, что, как известно из термодинамики, $p = -\omega$ (ω — плотность термодинамического потенциала Гиббса). В системе отсчета, движущейся вместе с жидкостью, справедливо термодинамическое равенство

$$\sigma = \frac{1}{T} (-\omega + \varepsilon - \mu \rho) \quad (4.4)$$

(μ — химический потенциал). Учитывая, что

$$d\sigma = \frac{1}{T} (d\varepsilon - \mu d\rho),$$

получим

$$\mu = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_\sigma,$$

откуда, используя (4.4), придем к формуле (4.3). Если найдено решение уравнений (4.2) для переменных ρ , π_k , σ , то зависимость переменной u_i от времени может быть восстановлена по известной зависимости от времени величин ρ , π_k :

$$\dot{u}_i = b_{ij} \frac{\pi_j}{\rho}.$$

5. ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ

В данном разделе будет показано, как могут быть получены СП для динамических переменных, описывающих состояние различных фаз жидких кристаллов [32]. При этом мы будем исходить из алгебры СП (2.14), (2.17), найденной при рассмотрении сплошных сред.

5.1. Нематические жидкие кристаллы. В нематической фазе жидких кристаллов происходит спонтанное нарушение вращательной инвариантности, поэтому, наряду с динамическими переменными, описывающими состояние изотропной жидкости, — плотностью массы ρ , плотностью импульса π_k , плотностью энтропии σ , необходимо рассмотреть также дополнительный параметр — единичный вектор $\mathbf{n}$ (директор), связанный с нарушением вращательной симметрии. Рассмотрим две возможности введения единичного вектора, одна из которых соответствует нематике с молекулами стержнеобразной формы, другая — нематике с дискообразными молекулами.

Пусть частицы среды состоят из молекул стержнеобразной формы. Тогда в состоянии равновесия можно задать некоторое семейство линий, касательные к которым в каждой точке совпадают с направлением стержней. Пусть $\xi_i = \xi_i(\alpha)$ — параметрические уравнения одной из линий этого семейства. Тогда направление стержней в каждой точке характеризуется вектором с координатами $\frac{d\xi_i}{d\alpha} \equiv a_i$. При деформации среды происходит изменение направлений молекул, и, следовательно, деформируются и линии семейства. Пусть $x_i = x_i(\alpha)$ — новые параметрические уравнения уже рассмотренной линии семейства после деформации. Тогда направление стержней в каждой точке после деформации характеризуется вектором $\frac{dx_i}{d\alpha} \equiv b_i$. Учитывая, что $x_i = x_i(\xi)$, легко видеть, что векторы a_i и b_i связаны соотношением

$$b_i = b_{ij}^{-1} a_j,$$

где $b_{ij} \equiv \partial \xi_i / \partial x_j$ (см. (2.3), (2.4)). Отсюда следует, что единичный вектор, связанный с направлением стержней, может быть введен формулой

$$n_i = \frac{b_i}{b}, \quad b_i = b_{ij}^{-1} a_j. \quad (5.1)$$

Здесь a_i — некоторый постоянный вектор. Используя определение b_{ij} (см. (2.4)) и СП (2.17), легко найти следующие СП:

$$\{\pi_i(x), b_{sl}^{-1}(x')\} = \delta(x-x') \nabla_i b_{sl}^{-1}(x) - \delta_{is} b_{kl}^{-1}(x') \nabla_k' \delta(x-x'). \quad (5.2)$$

Из (5.2) следует СП для переменных $\pi_i(x)$, $n_i(x)$:

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), n_j(x')\} &= \delta(x-x') \nabla_i n_j(x) - \delta_{ij}^{\perp}(x') n_k(x') \nabla_k' \delta(x-x'), \\ \delta_{ij}^{\perp}(x) &\equiv \delta_{ij} - n_i(x) n_j(x). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Скобки (5.3), наряду со скобками

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x-x'), \quad \{\pi_i(x), \rho(x')\} = \rho(x) \nabla_i' \delta(x-x'), \\ \{\pi_i(x), \pi_j(x')\} &= \pi_j(x) \nabla_i' \delta(x-x') - \pi_i(x') \nabla_j \delta(x-x'), \end{aligned} \quad (5.4)$$

образуют алгебру переменных нематика со стержнеобразными молекулами (мы выписываем только нетривиальные СП). Подчеркнем, что исходя из способа введения величин $\rho(x)$, $n_i(x)$ (см. (2.15), (5.1)) следует, что эта алгебра является подалгеброй алгебры (2.14), (2.17) динамических переменных сплошной среды. Используя СП (5.3), (5.4) и предполагая, что плотность энергии системы имеет вид $\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi(x), n(x), \nabla n(x))$, получим динамические уравнения нематика с идеальными стержнеобразными молекулами (см. также [20]):

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= -\nabla_i \left(\sigma \frac{\pi_i}{\rho} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \pi_k; \\ \dot{n}_i &= -\left(\frac{\pi_k}{\rho} \nabla_k \right) n_i + n_k \delta_{ij}^{\perp} \nabla_k \frac{\pi_j}{\rho}; \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\dot{\pi}_i = -\nabla_k t_{ik}, \quad t_{ik} = p \delta_{ik} + \frac{\pi_i \pi_k}{\rho} + \nabla_i n_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k n_j} - n_k \delta_{ij}^{\perp} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_j} - \nabla_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_l n_j} \right).$$

Если воспользоваться условием (2.22) вращательной инвариантности плотности энергии $\varepsilon(x)$, которое в данном случае представляется соотношением

$$\varepsilon_{ikj} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_k} n_j + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_s n_k} \nabla_s n_j + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k n_s} \nabla_j n_s \right) = 0, \quad (5.6)$$

то легко видеть, что дивергенцию $\nabla_k t_{ik}$ можно представить в виде дивергенции от следующего явно симметричного тензора $\tilde{t}_{ik}$:

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ik} &= p \delta_{ik} + \frac{\pi_i \pi_k}{\rho} + \frac{1}{2} (g_{km} \nabla_i n_m + g_{im} \nabla_k n_m) - \\ &- \frac{1}{2} (n_i h_k + n_k h_i) + \frac{1}{2} \nabla_m (g_{ik} n_m + g_{ki} n_m - g_{im} n_k - g_{km} n_i). \end{aligned}$$

Здесь

$$g_{ik} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_i n_k}, \quad h_i = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_j} - \nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k n_j} \right) \delta_{ij}^\perp.$$

Рассмотрим теперь нематик, состоящий из дискообразных молекул. Направление их ориентации задается единичным вектором нормали. Если ввести семейство поверхностей, касательные плоскости к которым в каждой точке совпадают с плоскостями дисков, то, как следует из предыдущего рассмотрения, два неколлинеарных вектора d_i, f_i , определяющих положение плоскости, могут быть представлены в виде $d_i = b_{ij}^{-1} m_j, f_i = b_{ij}^{-1} n_j$, где m_i, n_i — некоторые постоянные неколлинеарные векторы, определяющие положение плоскости в недеформированном состоянии. Тогда вектор нормали к плоскости, натянутой на векторы d_i, f_i , равен $c_i = l_k \partial \xi_k / \partial x_i \equiv l_k b_{ki}$, где $l_k = (\mathbf{m} \times \mathbf{n})_k$, и, следовательно, единичный вектор нормали к плоскости дискообразной молекулы определяется формулой

$$n_i = \frac{c_i}{c}, \quad c_i = l_k b_{ki}. \quad (5.7)$$

Здесь l_k — произвольный постоянный вектор, определяющий направление директора в недеформированном состоянии. Используя определение n_i и скобки (2.17), для переменных $\pi_i(x), n_i(x)$ получим следующие СП:

$$\{\pi_i(x), n_j(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i n_j(x) + \delta_{jk}^\perp(x') n_i(x') \nabla_k' \delta(x - x'). \quad (5.8)$$

СП (5.4), (5.8) образуют алгебру динамических переменных нематика с дискообразными молекулами, и эта алгебра является подалгеброй алгебры (2.14), (2.17) динамических переменных сплошной среды. Отметим, что обе скобки (5.3), (5.8) были найдены в [18] на основе использования законов преобразования контра- и ковариантных векторов при трансляциях. Предполагая опять, что $\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi(x), n(x), \nabla n(x))$, получим динамические уравнения нематика с дискообразными молекулами в виде

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= -\nabla_i \left(\sigma \frac{\pi_i}{\rho} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \pi_k, \\ \dot{n}_i &= -\left(\frac{\pi_k}{\rho} \nabla_k \right) n_i - n_k \delta_{ij}^\perp \nabla_j \frac{\pi_k}{\rho}, \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_k t_{ik}, \quad t_{ik} = p \delta_{ik} + \frac{\pi_i \pi_k}{\rho} + \nabla_l n_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k n_j} + n_i \delta_{jk}^\perp \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_j} - \nabla_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_l n_j} \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Учитывая условие вращательной инвариантности для $\varepsilon(x)$, которое записывается в прежнем виде (5.6), преобразуем дивергенцию $\nabla_k t_{ik}$ к дивергенции от следующего явно симметричного тензора $\tilde{t}_{ik}$:

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ik} = & p \delta_{ik} + \frac{\pi_i \pi_k}{\rho} + \frac{1}{2} (g_{km} \nabla_i n_m + g_{im} \nabla_k n_m) + \\ & + \frac{1}{2} (n_i h_k + n_k h_i) + \frac{1}{2} \nabla_m (g_{ik} n_m + g_{ki} n_m - g_{im} n_k - g_{km} n_i). \end{aligned}$$

Отметим, что для нематика часть плотности энергии, связанная с зависимостью от единичного вектора $\mathbf{n}$ и обладающая свойством вращательной инвариантности, может быть записана в виде [33]:

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} K_1 (\nabla_i n_i)^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (n_i \nabla_i n_k)^2. \quad (5.10)$$

Для нематиков, состоящих из дискообразных молекул, как следует из определения (5.7), инвариант $\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}$ равен нулю, и, следовательно, для рассматриваемого способа введения $\mathbf{n}$ это слагаемое должно быть опущено. Соотношение $\mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n} = 0$ совместно с уравнениями движения (5.9) для вектора $\mathbf{n}$, так как из них следует, что

$$\dot{w} = -\nabla_j \left(\frac{\pi_j}{\rho} w \right) + 2w n_i n_j \nabla_i \frac{\pi_j}{\rho}; \quad w \equiv \mathbf{n} \operatorname{rot} \mathbf{n}.$$

5.2. Другие типы жидкокристаллического упорядочения. Кратко остановимся на вопросе описания динамики других возможных жидкокристаллических состояний.

В холестерической фазе жидких кристаллов ее макроскопическая группа симметрии не содержит инверсии. Спонтанное нарушение трансляционной и вращательной симметрии состояния равновесия приводит к спиральному упорядочению директора в основном состоянии [33]. В соответствии с [20] динамика холестериков аналогична динамике нематиков; отличие проявляется в структуре разложения плотности энергии по градиентам директора. В силу сказанного выше плотность энергии холестерика может содержать нечетные по ∇ слагаемые.

В смектических жидких кристаллах нарушена трансляционная инвариантность вдоль одного из направлений [33]. Согласно [19] для смектика в набор гидродинамических величин входит вместо директора смектическая переменная $W(x)$. Мы определим смектическую переменную $W(x)$ формулой $W(x) \equiv m_j \xi_j(x)$, где m_j — произвольный постоянный вектор,

$\xi_j(x)$ — лагранжева координата частиц среды. Учитывая (2.3) и то, что $b_{ij} = \nabla_j \xi_i$, из (2.13) найдем скобку

$$\{\pi_k(x), \xi_i(x')\} = \delta(x - x') \nabla_k \xi_i. \quad (5.11)$$

Отсюда, сворачивая обе части (5.11) с вектором m_i , получим

$$\{\pi_k(x), W(x')\} = \delta(x - x') \nabla_k W(x). \quad (5.12)$$

Алгебра (5.4), (5.12) является основой для построения динамики смектика. Это построение вполне аналогично рассмотренному для случая нематика, где необходимо лишь учесть, что плотность энергии является функцией $\nabla_i W$: $\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi(x), \nabla W(x))$.

Дискотические жидкие кристаллы характеризуются спонтанным нарушением симметрии в двух направлениях. Имеются две дополнительные переменные W_α ($\alpha = 1, 2$), связанные с трансляционной инвариантностью, которые мы введем согласно формуле $W_\alpha(x) = m_i^\alpha \xi_i(x)$ (ср. со случаем смектика). СП плотности импульса $\pi_i(x)$ с величиной $W_\alpha(x)$ имеет вид

$$\{\pi_k(x), W_\alpha(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i W_\alpha(x). \quad (5.13)$$

Дальнейшее построение уравнений гидродинамики дискотика проводится на основе алгебры (5.4), (5.13) по схеме, изложенной для нематиков, с учетом того, что $\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi(x), \nabla W_\alpha(x))$. Отметим, что как для смектика, так и для дискотика алгебры (5.4), (5.12) и (5.4), (5.13), соответственно, являются подалгебрами динамических переменных сплошной среды. Замкнутая динамика для переменных смектика или дискотика, как и во всех рассмотренных ранее случаях, получается из общего случая динамики сплошной среды, если считать переменные, не входящие в подалгебру, циклическими.

5.3. Нематические эластомеры. Здесь мы рассмотрим некоторые особенности динамики нематических жидкокристаллических эластомеров, синтезированных в начале 80-х годов [34]. В последнее время интерес к ним значительно возрос [35,36] благодаря новым возможностям в их экспериментальном получении [37,38]. Нематические эластомеры характеризуются спонтанным нарушением вращательной симметрии и симметрии относительно пространственных трансляций. С этими нарушенными симметриями связаны дополнительные гидродинамические переменные: директор n_i (как в нематических жидких кристаллах) и вектор смещения u_i (как в кристаллических твердых телах). Физически тот факт, что вектор смещения является динамической переменной, соответствует тому, что в не-

матических эластомерах существует некоторая решетка из полимерных цепочек, обладающая в гидродинамическом пределе (при $\omega \rightarrow 0$) конечным модулем сдвига. Для того чтобы директор был хорошо определенной гидродинамической переменной, необходимо, чтобы среднее расстояние между узлами соседних цепочек было достаточно большим, и, соответственно, связь между цепочками слабой.

Предполагая, что гамильтониан системы инвариантен относительно однородных поворотов (и, следовательно, зависимость плотности энергии от вектора смещения идет только через посредство величин K_{ij} , см. разд.4), представим его в виде

$$H = \int d^3x \varepsilon(x), \quad \varepsilon = \frac{\pi^2}{2\rho} + v(\sigma, n_i, \nabla_j n_i, K_{ij}). \quad (5.14)$$

Алгебра СП динамических переменных системы может быть выписана на основе уже найденных скобок (2.14), (2.16), (5.3), (5.8) и имеет вид

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \\ \{b_{ij}(x), \pi_k(x')\} &= -b_{ik}(x') \nabla_j \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\{\pi_i(x), \rho(x')\} = \rho(x) \nabla_i \delta(x - x'),$$

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla_i' \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), n_j(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i n_j(x) - \delta_{ij}^\perp(x') n_k(x') \nabla_k' \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (5.15a)$$

$$\{\pi_i(x), n_j(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i n_j(x) + \delta_{jk}^\perp(x') n_i(x') \nabla_k' \delta(x - x'). \quad (5.15b)$$

Скобки (5.15a) соответствуют стержнеобразным нематическим эластомерам, скобки (5.15b) — дискообразным. Уравнения низкочастотной динамики, соответствующие функционалу энергии (5.14) и СП (5.15), имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= -\nabla_i \left(\sigma \frac{\pi_i}{\rho} \right), \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\pi_j}{\rho} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \pi_k, \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_j t_{ij}, \quad t_{ij} = p \delta_{ij} + \frac{\pi_i \pi_j}{\rho} + 2b_{mi} b_{mj} \frac{\partial v}{\partial K_{ml}} + \tilde{t}_{ij}(n), \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\dot{n}_i = -\left(\frac{\pi_k}{\rho} \nabla_k \right) n_i + n_k \delta_{ij}^\perp \nabla_k \frac{\pi_j}{\rho}, \quad (5.16a)$$

$$\dot{n}_i = -\left(\frac{\pi_k}{\rho} \nabla_k \right) n_i - n_k \delta_{ij}^\perp \nabla_j \frac{\pi_k}{\rho}. \quad (5.16b)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ik}(n) = & \frac{1}{2} (g_{km} \nabla_i n_m + g_{im} \nabla_k n_m) \mp \\ & \mp \frac{1}{2} (n_i h_k + n_k h_i) + \frac{1}{2} \nabla_m (g_{ik} n_m + g_{ki} n_m - g_{im} n_k - g_{km} n_i), \end{aligned}$$

и верхний знак отвечает стержнеобразным молекулам, нижний — дискообразным. Конкретная структура функционала энергии $v = v(\sigma, n_i, \nabla_j n_i, K_{ij})$, который имеет достаточно громоздкий вид, приведена в [36].

6. МАГНЕТИК С ПОЛНЫМ НАРУШЕНИЕМ СИММЕТРИИ ОТНОСИТЕЛЬНО СПИНОВЫХ ВРАЩЕНИЙ

В данном и последующем разделах мы остановимся на изучении магнитоупорядоченных систем с нарушенной симметрией относительно спиновых вращений. Случай полного нарушения симметрии относительно спиновых вращений в магнитных средах впервые рассматривался в [39]. Линейные динамические уравнения для таких систем получены в [40,41], а их нелинейное обобщение дано в рамках метода феноменологических лагранжианов в [25,42], а также в гамильтоновом подходе в [16, 27]. Анализ возможных спектров спиновых волн проведен в [25,41,42] без учета процессов релаксации и в предположении, что состояние равновесия магнитных систем является трансляционно-инвариантным.

Для адекватного описания термодинамики и кинетики систем со спонтанно нарушенной симметрией необходимо ввести в теорию дополнительные термодинамические параметры, которые не связаны с законами сохранения, а обусловлены физической природой фазы исследуемого состояния. Известно [43], что в случае систем с полным спонтанным нарушением симметрии относительно спиновых вращений этими динамическими величинами являются углы поворота φ_α , осуществляющие параметризацию группы трехмерных вращений спинового пространства, или связанная с ними вещественная матрица поворота $a(\varphi)$ ($a\tilde{a} = 1$, здесь и далее под знаком $\sim$ понимается операция транспонирования), которая в экспоненциальной параметризации имеет вид

$$a(\varphi) = \exp(-\varepsilon\varphi), \quad (\varepsilon\varphi)_{\alpha\beta} \equiv \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \varphi_\gamma. \quad (6.1)$$

С матрицей поворота $a(\varphi)$ сопоставляются правая $\underline{\omega}_{\alpha k}$ и левая $\omega_{\alpha k}$ дифференциальные формы Картана, определяемые соотношениями

$$\underline{\omega}_{\alpha k} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_{\beta\lambda} \nabla_k a_{\gamma\lambda}, \quad \omega_{\alpha k} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_{\lambda\gamma} \nabla_k a_{\lambda\beta}. \quad (6.2)$$

Для получения алгебры СП динамических переменных магнетика запишем кинематическую часть лагранжиана в виде

$$L_k = \int d^3x \mathcal{L}_k(x), \quad \mathcal{L}_k(x) = -s_\alpha(x) \omega_\alpha(x), \quad (6.3)$$

где ω_α — левая форма Картана, связанная с временной производной:

$$\omega_\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\tilde{a}\dot{a})_{\gamma\beta}.$$

Найдем какие-либо преобразования, оставляющие кинематическую часть инвариантной. С этой целью рассмотрим вариации $\delta a_{\alpha\beta}$ матрицы поворота, для которых сохраняется условие ортогональности $\tilde{a}a = 1$:

$$\delta \tilde{a}a + \tilde{a} \delta a = 0,$$

Так как вариации $\delta a_{\alpha\beta}$ определяются тремя бесконечно малыми параметрами (например, вариациями углов φ_α в формуле (6.1)), то в качестве этих параметров можно принять величины

$$R_{\alpha\beta} = \tilde{a}_{\alpha\mu} \delta a_{\mu\beta}, \quad \tilde{R} = -R.$$

Вариация левой формы Картана для преобразований

$$\delta a = aR \quad (6.4)$$

равна

$$\delta \omega_\alpha = \dot{R}_\alpha + (\omega \times R)_\alpha, \quad R_\alpha \equiv \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} R_{\gamma\beta}. \quad (6.5)$$

Рассмотрим не зависящие от времени ($\dot{R} = 0$) вариации (6.5), и, наряду с ними, преобразования плотности спина:

$$\delta \omega_\alpha = (\omega \times R)_\alpha, \quad \delta s_\alpha = (s \times R)_\alpha. \quad (6.6)$$

Закон преобразования плотности спина определен таким образом, чтобы кинематическая часть лагранжиана была инвариантна относительно данного класса вариаций, $\delta L_k = 0$.

Генератор преобразований (6.4), (6.6), согласно общей теории, равен

$$G = -\frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \int d^3x s_\alpha(x) \tilde{a}_{\gamma\mu}(x) \delta a_{\mu\beta}(x) = -\int d^3x s_\alpha(x) R_\alpha(x).$$

Представим канонические преобразования (6.4), (6.6) в виде

$$\delta a_{\alpha\beta}(x) = \{a_{\alpha\beta}(x), G\}, \quad \delta s_\alpha(x) = \{s_\alpha(x), G\}. \quad (6.7)$$

Выражая вариации δa , δs через величину R :

$$\delta a_{\alpha\beta} = -a_{\alpha\rho} \varepsilon_{\rho\beta\gamma} R_\gamma, \quad \delta s_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\beta R_\gamma$$

и сравнивая левую и правую части формул (6.7), в силу произвольности R_α найдем СП:

$$\{a_{\alpha\beta}(x), s_\gamma(x')\} = a_{\alpha\beta}(x) \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \delta(x - x'), \quad \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'). \quad (6.8)$$

Для получения СП $\{a_{\alpha\beta}(x), a_{\mu\nu}(x')\}$ воспользуемся экспоненциальной параметризацией (6.1) матрицы поворота и, вычисляя производную $\dot{a}$ в величине ω_α , представим плотность кинематической части лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = g_\lambda(x) \dot{\phi}_\lambda(x), \quad g_\lambda \equiv -\frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\alpha \left(\tilde{a} \frac{\partial a}{\partial \phi_\lambda} \right)_{\lambda\beta}. \quad (6.9)$$

Наряду с (6.9) рассмотрим также плотность кинематической части

$$\mathcal{L}'_k(x) = -\phi_\lambda(x) \dot{g}_\lambda(x) \quad (6.10)$$

(выражение (6.10) отличается от (6.9) полной производной по времени $(\phi_\lambda \dot{g}_\lambda)$). Рассмотрим вариации

$$\delta\phi_\lambda(x) = 0, \quad \delta g_\lambda(x) = \chi_\lambda(x) \quad (6.11)$$

(функции χ_λ не зависят от ϕ_λ, g_λ), оставляющие кинематическую часть инвариантной. Вариациям (6.11) соответствует генератор

$$G = - \int d^3x \phi_\alpha(x) \chi_\alpha(x).$$

Поскольку

$$\delta\phi_\alpha(x) = \{\phi_\alpha(x), G\} = 0,$$

то отсюда получим

$$\{\phi_\lambda(x), \phi_\mu(x')\} = 0.$$

Из этой формулы, с учетом (6.1), следует, что

$$\{a_{\alpha\beta}(x), a_{\mu\nu}(x')\} = 0. \quad (6.12)$$

Соотношение $\chi_\lambda(x) = \{g_\lambda(x), G\}$ автоматически выполняется в силу (6.8) и определения (6.9) величины g_λ .

Система СП (6.8), (6.12) образует алгебру для переменных магнетика с полным нарушением симметрии относительно спиновых вращений — плотности спина $s_\alpha(x)$ и матрицы поворота $a_{\alpha\beta}(x)$.

Рассмотрим теперь вопрос о построении генератора пространственных трансляций в пространстве переменных $s_\alpha(x), a_{\alpha\beta}(x)$. Для конечных преобразований

$$x \rightarrow x' = x'(x)$$

определим закон преобразования динамических переменных $s_\alpha(x)$, $a_{\alpha\beta}(x)$ так, чтобы кинематическая часть лагранжиана оставалась инвариантной, $L_k(s(x), a(x)) = L_k(s(x'), a(x'))$:

$$s_\alpha(x) \rightarrow s'_\alpha(x') = \left| \frac{\partial x}{\partial x'} \right| s_\alpha(x), \quad a_{\alpha\beta}(x) \rightarrow a'_{\alpha\beta}(x') = a_{\alpha\beta}(x). \quad (6.13)$$

Действительно, из (6.13) следует, что

$$\omega_{\alpha\beta}(x) \rightarrow \omega'_{\alpha\beta}(x') = \omega_{\alpha\beta}(x),$$

и поэтому

$$L_k = - \int d^3 x' s'_\alpha(x') \omega'_\alpha(x') = - \int d^3 x s'_\alpha(x) \omega'_\alpha(x). \quad (6.14)$$

Согласно (6.14), вариации динамических переменных s , a при бесконечно малых преобразованиях $x_i \rightarrow x'_i = x_i + \delta x_i(x)$ должны быть определены равенствами

$$\delta s_\alpha(x) = s'_\alpha(x) - s_\alpha(x), \quad \delta a_{\alpha\beta} = a'_{\alpha\beta}(x) - a_{\alpha\beta}(x). \quad (6.15)$$

С учетом (6.13), для вариаций (6.15) получим

$$\delta s_\alpha(x) = -\nabla_k(s_\alpha(x) \delta x_k(x)), \quad \delta a_{\alpha\beta}(x) = -\delta x_k(x) \nabla_k a_{\alpha\beta}(x). \quad (6.16)$$

Генератор преобразований (6.16) имеет вид

$$G = -\frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \int d^3 x s_\alpha(x) (\tilde{a} \delta a)_{\gamma\beta} = \int d^3 x s_\alpha(x) \omega_{\alpha k}(x) \delta x_k(x),$$

или

$$G = \int d^3 x \pi_k^s(x) \delta x_k(x), \quad \pi_k^s \equiv s_\alpha \omega_{\alpha k}. \quad (6.17)$$

Величина $\pi_k^s(x)$, определяющая генератор пространственных трансляций в пространстве переменных s, a , имеет смысл плотности импульса магнов. Поскольку для канонических преобразований справедливо представление

$$\delta s_\alpha(x) = \{s_\alpha(x), G\}, \quad \delta a_{\alpha\beta}(x) = \{a_{\alpha\beta}(x), G\},$$

то, подставляя сюда выражения для вариаций (6.16), с учетом произвольности функций $\delta x_i(x)$, получим СП:

$$\begin{aligned} \{s_\alpha(x), \pi_k^s(x')\} &= s_\alpha(x') \nabla'_k \delta(x - x'), \\ \{a_{\alpha\beta}(x), \pi_k^s(x')\} &= -\delta(x - x') \nabla_k a_{\alpha\beta}(x). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Для нахождения СП $\{\pi_k^s(x), \pi_l^s(x)\}$ запишем вариацию левой формы Картана при преобразованиях (6.16). Из определения (6.2) следует, что

$$\delta\omega_{\alpha k}(x) = -\delta x_l(x)\nabla_l\omega_{\alpha k}(x) - \omega_{\alpha l}(x)\nabla_k\delta x_l(x). \quad (6.19)$$

Отсюда, принимая во внимание выражение для π_k^s , получим

$$\delta\pi_k^s(x) = -\pi_l^s(x)\nabla_k\delta x_l(x) - \nabla_l(\pi_k^s(x)\delta x_l(x)).$$

Представляя, с другой стороны, вариацию $\delta\pi_k^s$ в виде

$$\delta\pi_k^s(x) = \{\pi_k^s(x), G\}, \quad G = \int d^3x \pi_l^s(x)\delta x_l(x) \quad (6.20)$$

и сравнивая левую и правую части формулы (6.20), в силу произвольности функций $\delta x_l(x)$, найдем СП:

$$\{\pi_k^s(x), \pi_l^s(x')\} = \pi_l^s(x)\nabla'_k\delta(x-x') - \pi_k^s(x')\nabla_l\delta(x-x'). \quad (6.21)$$

Как следует из (6.21), СП для плотности импульса магнонов имеют стандартный вид (см.(2.12)).

Плотность энергии рассматриваемой магнитной системы в общем случае представляет собой функционал спиновых плотностей $s_\alpha(x)$ и ортогональной матрицы поворота $a(x)$:

$$\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(x, s(x'), a(x')). \quad (6.22)$$

Уравнения движения, соответствующие СП (6.8), (6.12) и функциональному выражению (6.22), записываются в виде

$$\dot{s}_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\delta H}{\delta s_\beta} s_\gamma + \frac{\delta \dot{H}}{\delta a_{\rho\beta}} a_{\rho\gamma} \right), \quad \dot{a}_{\alpha\beta} = a_{\alpha\rho} \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\gamma} \quad (6.23)$$

и являются обобщением уравнения Ландау — Лифшица на магнитные системы с полным спонтанным нарушением симметрии. Как следует из (6.23), в общем случае величина S^2 не сохраняется. Отметим, что из алгебры (6.8), (6.12) может быть выделена подалгебра СП только спиновых переменных $s_\alpha(x)$, что соответствует рассмотрению ферромагнетика. Замкнутая динамика для переменных s_α получается в предположении, что гамильтониан системы не зависит от матрицы поворота $a_{\alpha\beta}$. Формулировка гамильтонова подхода только для переменных s_α , без привлечения матрицы поворота $a_{\alpha\beta}(\varphi)$, невозможна, так как в этом случае число независимых динамических переменных s_α является нечетным.

Запишем теперь уравнения динамики в локальной форме (в отличие от уравнений (6.23) в нелокальной форме). Мы будем предполагать, что плотность энергии является функцией величин s , a , ∇a или, что то же самое, функцией величин s , a , ω_k :

$$\varepsilon(x; s(x'), a(x'), \omega_k(x')) = \varepsilon(s(x), a(x), \omega_k(x)). \quad (6.24)$$

Кроме того, поскольку основные взаимодействия в системе носят обменный характер, будем считать, что плотность энергии инвариантна относительно однородных вращений в спиновом пространстве, описываемых матрицей b :

$$\varepsilon(x; bs(x'), a(x')\tilde{b}) = \varepsilon(x; s(x'), a(x')). \quad (6.25)$$

Из формулы (6.25) следует, что

$$\varepsilon(s, \omega_k, a) = \varepsilon(as, a\omega_k, 1) \equiv \varepsilon(\underline{s}, \underline{\omega}_k), \quad (6.26)$$

где $\underline{s} = as$, $\underline{\omega} = a\omega_k$. Принимая во внимание (6.2), (6.8), (6.12), получим соотношения

$$\{s_\alpha(x), \underline{\omega}_{\beta k}(x')\} = a_{\beta\alpha}(x')\nabla'_k \delta(x - x'), \quad \{s_\alpha(x), \underline{s}_\beta(x')\} = 0,$$

приводящие к свойству инвариантности величин $\underline{s}$, $\underline{\omega}_k$ относительно глобальных поворотов:

$$\{S_\alpha, \underline{\omega}_{\beta k}(x)\} = \{S_\alpha, \underline{s}_\beta(x)\} = 0,$$

что соответствует свойству инвариантности плотности энергии (6.26):

$$\{S_\alpha, \varepsilon(x)\} = 0, \quad S_\alpha = \int d^3x s_\alpha(x). \quad (6.27)$$

Формула (6.27) позволяет записать дифференциальный закон сохранения плотности спина $s_\alpha(x)$ в виде (1.17). Вычисляя СП в (1.17), с использованием (6.24), (6.8), (6.12), для плотности потока спина $j_{\alpha k}$ получим

$$j_{\alpha k} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}.$$

Дифференциальный закон сохранения энергии рассматриваемой системы имеет вид (1.18). Вычисление СП в (1.18) приводит к следующему выражению для плотности потока энергии:

$$q_k = \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}.$$

Ранее мы получили выражение для генератора бесконечно малых пространственных трансляций (6.16). Из формул (6.16), (6.19) следует условие трансляционной инвариантности плотности энергии:

$$\{P_k, \varepsilon(x)\} = \nabla_k \varepsilon(x), \quad P_k \equiv \int d^3x s_\alpha \omega_{\alpha k}.$$

Отсюда для плотности импульса магнонов π_k^s получим дифференциальный закон сохранения (1.16). Вычисление СП приводит к выражению

$$t_{ik} = - \left(\varepsilon - s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \right) \delta_{ik} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}.$$

Здесь t_{ik} — плотность потока импульса магнонов (тензор натяжений).

Таким образом, динамические уравнения для магнетиков со спонтанно нарушенной симметрией в длинноволновом случае имеют вид

$$\dot{s}_\alpha = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}, \quad \dot{a}_{\alpha\beta} = a_{\alpha\rho} \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\gamma}.$$

Отсюда и из (6.24) следует формула

$$\dot{\varepsilon} = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}},$$

что находится в соответствии с выражением для плотности потока энергии q_k .

В силу определения плотности энергии (6.26) целесообразно в качестве независимых переменных выбрать величины $\underline{s}$, $\underline{\omega}_k$. Тогда

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon} &= -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{s}_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\omega}_{\alpha k}}, \quad \dot{a}_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\rho\gamma} a_{\rho\beta} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{s}_\gamma}, \\ \dot{\underline{s}}_\alpha &= -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\omega}_{\alpha k}} + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\underline{s}_\beta \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{s}_\gamma} + \underline{\omega}_{\beta k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\omega}_{\gamma k}} \right). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Из уравнения движения для матрицы a в (6.28) следует уравнение движения для величины $\underline{\omega}_{\alpha k}$:

$$\dot{\underline{\omega}}_{\alpha k} = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{s}_\alpha} + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \underline{\omega}_{\beta k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{s}_\gamma}. \quad (6.29)$$

Уравнения (6.28) определяют динамические свойства системы в пренебрежении диссипативными процессами и описывают низкочастотную динамику многоподрешеточного магнетика с обменным взаимодействием, когда при достаточно больших временах благодаря сильному обмену формируются жесткие комплексы спинов, которые практически не деформируются и ориентация которых задается матрицей поворота a .

7. ОДНООСНЫЙ СПИРАЛЬНЫЙ МАГНЕТИК

Рассмотрим случай одноосного спирального магнетика, когда плотность энергии как функция вектора спина $\underline{s}_\alpha$ и величины $\underline{\omega}_{\alpha k}$ имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon(l_\alpha \underline{s}_\alpha, l_\alpha \underline{\omega}_{\alpha k}) \equiv \varepsilon(s, p_k), \quad (7.1)$$

где l_α — единичный вектор спонтанной «анизотропии», не зависящий от координат и времени (подчеркнем, что плотность энергии (7.1) по-прежнему инвариантна относительно спиновых вращений). Алгебра динамических переменных — компоненты спина s вдоль оси анизотропии и вектора спирали p_k — может быть получена, с учетом определения (7.1), из более общей алгебры переменных $\underline{s}_\alpha, \underline{\omega}_{\alpha k}$:

$$\{\underline{s}_\alpha(x), \underline{s}_\beta(x')\} = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \underline{s}_\gamma \delta(x-x'), \quad \{\underline{\omega}_{\alpha k}(x), \underline{\omega}_{\beta l}(x')\} = 0,$$

$$\{\underline{s}_\alpha(x), \underline{\omega}_{\beta k}(x')\} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \underline{\omega}_{\gamma k}(x) \delta(x-x') + \delta_{\alpha\beta} \nabla'_k \delta(x-x')$$

и имеет вид

$$\{s(x), p_k(x')\} = \nabla'_k \delta(x-x'), \quad \{s(x), s(x')\} = \{p_k(x), p_l(x')\} = 0.$$

Для величин s, p_k , согласно (6.28), (6.29), справедливы уравнения движения

$$\dot{s} = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial s}. \quad (7.2)$$

Поперечные значения спина $\underline{s}_\alpha^\perp$ и формы Картана $\underline{\omega}_{\alpha k}^\perp$, определяемые соотношениями

$$\underline{s}_\alpha = s l_\alpha + \underline{s}_\alpha^\perp, \quad \underline{\omega}_{\alpha k} = l_\alpha p_k + \underline{\omega}_{\alpha k}^\perp,$$

удовлетворяют уравнениям вида

$$\dot{\underline{s}}_\alpha^\perp = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma \left(\underline{s}_\beta^\perp \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} + \underline{\omega}_{\beta k}^\perp \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right), \quad \dot{\underline{\omega}}_{\alpha k}^\perp = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \underline{\omega}_{\beta k}^\perp.$$

Используя ограничения, налагаемые на формы Картана $\underline{\omega}_{\alpha k}$ соотношениями Маурера — Картана

$$\nabla_k \underline{\omega}_{\alpha i} - \nabla_i \underline{\omega}_{\alpha k} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \underline{\omega}_{\beta k} \underline{\omega}_{\gamma i},$$

нетрудно получить равенства

$$\nabla_k p_i - \nabla_i p_k = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma \underline{\omega}_{\alpha k}^\perp \underline{\omega}_{\beta i}^\perp,$$

$$\nabla_k \underline{\omega}_{\gamma i}^\perp - \nabla_i \underline{\omega}_{\gamma k}^\perp = (\delta_{\gamma\lambda} - l_\gamma l_\lambda) \varepsilon_{\lambda\alpha\beta} \underline{\omega}_{\alpha k}^\perp \underline{\omega}_{\beta i}^\perp + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\underline{\omega}_{\alpha k}^\perp l_\beta p_i + \underline{\omega}_{\beta i}^\perp l_\alpha p_k). \quad (7.3)$$

Легко видеть, что последнее соотношение содержит тривиальное решение $\underline{\omega}_{\gamma i}^\perp = 0$, вследствие чего условие (7.3) для вектора спирали p_k приобретает вид

$$\text{rot } p = 0.$$

Для поперечной компоненты спина $\underline{s}_\alpha^\perp$ справедливо уравнение движения

$$\dot{\underline{s}}_\alpha^\perp = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma \underline{s}_\beta^\perp \frac{\partial \varepsilon}{\partial s}. \quad (7.4)$$

Линеаризация уравнений (7.2), (7.4) около равновесных значений $s = s^0$, $p_k = p_k^0$ приводит к двум голдстоуновским [44]:

$$\omega_\pm(k) = k_i \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial s} \pm \sqrt{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial s^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_l}} k_i k_l$$

и одной активационной $\omega^2 = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right)^2$ модам.

8. АНТИФЕРРОМАГНЕТИК

Рассмотрим теперь случай [45], когда зависимость от матрицы поворота $a_{\alpha\beta}$ в гамильтониане системы содержится только посредством комбинации $l_\beta a_{\beta\alpha} \equiv l_\alpha$ (l_β — некоторый постоянный вектор):

$$\varepsilon = \varepsilon(s_\alpha, l_\beta a_{\beta\alpha}) \equiv \varepsilon(s_\alpha, l_\alpha). \quad (8.1)$$

Вектор антиферромагнетизма l_α и плотность спина s_α являются теми основными динамическими переменными, в терминах которых строится гидродинамическая (низкочастотная) теория антиферромагнетика. Алгебра переменных s_α, l_α может быть получена, с учетом определения (8.1), из более общей алгебры (6.8), (6.12) переменных $a_{\alpha\beta}, s_\alpha$ и имеет вид

$$\begin{aligned} \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), l_\beta(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma(x) \delta(x - x'), \\ \{l_\alpha(x), l_\beta(x')\} &= 0. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Полагая в (1.6) последовательно $\varphi_\alpha(x) = s_\alpha(x)$ и $\varphi_\alpha(x) = l_\alpha(x)$, получим уравнения движения для спина s_α и вектора антиферромагнетизма l_α в виде

$$\begin{aligned}\dot{s}_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\delta H}{\delta s_\beta} s_\gamma + \frac{\delta H}{\delta l_\beta} l_\gamma \right), \\ \dot{l}_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\beta} l_\gamma.\end{aligned}\quad (8.3)$$

Интегрирование уравнений (8.3) значительно упрощается в длинноволновом пределе, когда пространственные неоднородности динамических переменных малы. Отметим, что при получении алгебры (8.2) мы считали вектор антиферромагнетизма вектором произвольной длины. Такое описание эквивалентно описанию антиферромагнетика в терминах единичного вектора l_α , если считать, что функционал энергии системы зависит от l_α только посредством отношения l_α/l . В дальнейшем мы будем всюду явно предполагать l_α единичным вектором, $l_\alpha^2 = 1$. При этом, поскольку величина l_α^2 является интегралом движения, СП (8.2) сохраняют свой вид и для случая $l_\alpha^2 = 1$. Считая, что плотность энергии является функцией величин $s_\alpha, l_\alpha, \nabla_k l_\alpha$ или, что то же самое, функцией величин $s_\alpha, l_\alpha, v_{\alpha k} \equiv -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\beta \nabla_k l_\gamma$

$$\varepsilon(x, s(x'), l(x')) = \varepsilon(s(x), l(x), v_k(x)),$$

получим динамические уравнения в локальной форме. В силу того, что вариации величин $l_\alpha, v_{\alpha k}$ не являются независимыми:

$$l_\alpha \delta l_\alpha = 0, \quad l_\alpha \delta v_{\alpha k} + v_{\alpha k} \delta l_\alpha = 0,$$

мы фиксируем производные $\frac{\partial a}{\partial l_\alpha}, \frac{\partial a}{\partial v_{\alpha k}}$ (a — произвольная функция s, l, v_k) дополнительными требованиями

$$l_\alpha \frac{\partial a}{\partial l_\alpha} = 0, \quad l_\alpha \frac{\partial a}{\partial v_{\alpha k}} = 0.$$

С учетом этого и с учетом формул (1.17), (1.18) представим динамические уравнения антиферромагнетика в длинноволновом пределе в виде

$$\dot{s}_\alpha = -\nabla_k \frac{\partial \epsilon}{\partial v_{\alpha k}}, \quad \dot{\epsilon} = -\nabla_k \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\alpha} \frac{\partial \epsilon}{\partial v_{\alpha k}}, \quad \dot{l}_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\beta} l_\gamma. \quad (8.4)$$

Отсюда следует, что

$$\dot{v}_{\alpha k} = -(\delta_{\alpha\beta} - l_\alpha l_\beta) \nabla_k \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\beta} + \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\beta} v_{\gamma k}.$$

Полная система уравнений (8.4) определяет динамические свойства антиферромагнетиков в пренебрежении диссипативными процессами. Уравнения (8.4) допускают спиральные решения, для которых зависимость от координат и времени величин $s_\alpha(x)$, $l_\alpha(x)$ определяется формулами

$$s(x, t) = \underline{s}a(x, t), \quad l(x, t) = \underline{l}a(x, t), \quad (8.5)$$

где $\underline{s}$, $\underline{l}$ — некоторые постоянные векторы, и матрица $a(x, t)$ имеет вид

$$a(x, t) = \exp \epsilon(\underline{p}x - \underline{h}t) b. \quad (8.6)$$

Здесь

$$\epsilon_{\alpha\nu} \equiv \epsilon_{\mu\lambda\nu} n_\lambda, \quad \underline{h}n_\lambda \equiv \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\lambda},$$

n_λ — единичный вектор и b — произвольная матрица поворота, не зависящая от координат и времени. Величина p_k в (8.6) имеет смысл вектора спирали. Из уравнений (8.4) получим ограничения на независимые значения $p_k, s_\alpha, l_\alpha, v_{\alpha k}$:

$$\epsilon_{\alpha\rho\nu} n_\nu \left\{ s_\rho \left(n_\lambda \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\lambda} \right) - p_k \frac{\partial \epsilon}{\partial v_{\rho k}} \right\} = 0.$$

Отметим, что для спиральных решений (8.5), (8.6)

$$v_{\alpha k} \equiv a_{\alpha\beta} v_{\beta k} = (\delta_{\alpha\beta} - l_\alpha l_\beta) n_\beta p_k.$$

Линеаризация уравнений (8.4) вблизи состояния равновесия $l_\alpha = l_\alpha^0$, $p_k = 0$, $s_\alpha = 0$ приводит к спектру спиновых волн [45]:

$$\omega^2 = c^2 k^2, \quad c^2 = \frac{1}{12} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial v_k^2} (\delta_{\alpha\beta} - l_\alpha l_\beta) \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial s_\alpha \partial s_\beta},$$

что совпадает с результатом работы [46].

9. МАГНЕТИК С КВАДРУПОЛЬНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА

В этом разделе мы покажем, как, исходя из стандартного выражения для действия

$$W = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \{c_{\alpha\beta}(x) \dot{a}_{\beta\alpha}(x) - H(c, a)\} \quad (9.1)$$

($c_{\alpha\beta}$, $a_{\alpha\beta}$ — динамические переменные, H — гамильтониан), можно построить динамику магнитоупорядоченных систем с квадрупольным параметром порядка, связав формальные динамические переменные $c_{\alpha\beta}(x)$, $a_{\alpha\beta}(x)$ с физическими динамическими переменными, которые используются в теории магнетизма [47]. В отличие от предыдущего рассмотрения, в (9.1) под матрицей $a_{\alpha\beta}$ понимается матрица произвольного аффинного преобразования. Смысл употребления одного и того же обозначения будет ясен из дальнейшего изложения. Используя известные выражения для СП динамических переменных a , c :

$$\begin{aligned} \{a_{\alpha\beta}(x), a_{\mu\nu}(x')\} &= \{c_{\alpha\beta}(x), c_{\mu\nu}(x')\} = 0, \\ \{a_{\alpha\beta}(x), c_{\mu\nu}(x')\} &= \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (9.2)$$

можно найти СП для физических динамических переменных квадрупольного магнетика.

Получим предварительно формулы, связывающие динамические переменные a , c с динамическими переменными, имеющими непосредственный физический смысл. Введем спин системы как генератор однородных бесконечно малых вращений, характеризуемых углом $\delta\phi_\alpha$. Так как при повороте, описываемом матрицей b , матрицы a и c преобразуются согласно равенствам

$$a \rightarrow a' = a\tilde{b}, \quad c \rightarrow c' = bc$$

(при этих преобразованиях остается инвариантной кинематическая часть

действия $W_k = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x c_{\alpha\beta}(x) \dot{a}_{\beta\alpha}(x)$, то, полагая $b = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon_{\mu\nu} \equiv \varepsilon_{\mu\lambda\nu} \delta\phi_\lambda$, получим

$$\delta a_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\gamma\beta\nu} a_{\alpha\gamma} \delta\phi_\nu, \quad \delta c_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\gamma\alpha\nu} c_{\gamma\beta} \delta\phi_\nu. \quad (9.3)$$

Легко видеть, что вариации (9.3) представимы в виде

$$\delta a_{\alpha\beta}(x) = \{a_{\alpha\beta}(x), G\}, \quad \delta c_{\alpha\beta}(x) = \{c_{\alpha\beta}(x), G\},$$

где

$$G = \delta\varphi_\alpha \int d^3x \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} c_{\gamma\mu}(x) a_{\nu\beta}(x),$$

есть генератор преобразований (9.3). Записывая его в виде

$$G = \delta\varphi_\alpha \int d^3x s_\alpha(x),$$

для плотности спина $s_\alpha(x)$ получим выражение

$$s_\alpha(x) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} c_{\gamma\mu}(x) a_{\nu\beta}(x). \quad (9.4)$$

В дальнейшем нам удобно будет ввести тензор $g_{\alpha\beta}$:

$$g_{\alpha\beta} = c_{\alpha\nu} a_{\nu\beta}. \quad (9.5)$$

Тогда плотность спина выражается через антисимметричную часть $g_{\alpha\beta}$:

$$s_\alpha(x) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} g_{\gamma\beta}^a(x), \quad g_{\mu\nu}^a \equiv \frac{1}{2} (g_{\mu\nu} - g_{\nu\mu}). \quad (9.6)$$

В свою очередь, как следует из (9.6), антисимметричная часть тензора $g_{\alpha\beta}$ однозначно определяется плотностью спина

$$g_{\alpha\beta}^a = -\frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma.$$

Обозначая

$$g_{\alpha\beta}^s \equiv f_{\alpha\beta}, \quad g_{\alpha\beta}^s = \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha}), \quad (9.7)$$

запишем

$$g_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma.$$

Таким образом, в качестве динамических переменных систем необходимо выбрать плотность спина $s_\alpha(x)$, матрицу $a_{\alpha\beta}(x)$ произвольных аффинных преобразований, а также симметричную матрицу $f_{\alpha\beta}(x)$ (в дальнейшем мы выясним, что матрица $f_{\alpha\beta}$ является матрицей квадрупольного момента). Учитывая представление (9.5) матрицы $g_{\alpha\beta}$ и формулы (9.2), легко получить следующую алгебру для переменных $a_{\alpha\beta}(x)$, $g_{\alpha\beta}(x)$:

$$\{a_{\alpha\beta}(x), g_{\mu\nu}(x')\} = \delta_{\beta\mu} a_{\alpha\nu}(x) \delta(x - x'),$$

$$\{g_{\alpha\beta}(x), g_{\mu\nu}(x')\} = (g_{\alpha\nu}(x) \delta_{\beta\mu} - g_{\mu\beta}(x) \delta_{\alpha\nu}) \delta(x - x'). \quad (9.8)$$

Переменные $s_\alpha(x)$, $f_{\alpha\beta}(x)$ связаны с переменными $g_{\alpha\beta}(x)$ соотношениями (9.6), (9.7). Отсюда и из (9.8) найдем СП для динамических переменных $s_\alpha(x)$, $a_{\alpha\beta}(x)$ и $f_{\alpha\beta}(x)$:

$$\begin{aligned} \{f_{\alpha\beta}(x), f_{\mu\nu}(x')\} &= \frac{1}{4} (\epsilon_{\alpha\gamma\nu} \delta_{\beta\mu} + \epsilon_{\beta\gamma\mu} \delta_{\alpha\nu} + \epsilon_{\beta\gamma\nu} \delta_{\alpha\mu} + \epsilon_{\alpha\gamma\mu} \delta_{\beta\nu}) s_\gamma(x) \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), f_{\beta\gamma}(x')\} &= (\epsilon_{\alpha\beta\gamma} f_{\gamma\rho}(x) + \epsilon_{\alpha\gamma\rho} f_{\beta\rho}(x)) \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (9.9)$$

$$\{a_{\alpha\beta}(x), s_\mu(x')\} = \epsilon_{\beta\mu\rho} a_{\alpha\rho}(x) \delta(x - x'), \quad \{a_{\alpha\beta}(x), a_{\mu\nu}(x')\} = 0,$$

$$\{a_{\alpha\beta}(x), f_{\mu\nu}(x')\} = \frac{1}{2} (\delta_{\beta\mu} a_{\alpha\nu}(x) + \delta_{\beta\nu} a_{\alpha\mu}(x)) \delta(x - x'). \quad (9.10)$$

Первые три формулы (9.9) определяют подалгебру динамических переменных s , f . Приведем физическую интерпретацию этой подалгебры. С этой целью заменим, согласно общим правилам квантовой механики, динамические переменные s_α , $f_{\alpha\beta}$ на операторы $\hat{s}_\alpha$, $\hat{f}_{\alpha\beta}$ и СП $\{..., \dots\}$ на коммутаторы $\frac{1}{i} [..., \dots]$. Тогда соотношения (9.9) примут вид

$$\begin{aligned} [\hat{f}_{\alpha\beta}(x), \hat{f}_{\mu\nu}(x')] &= \frac{i}{4} (\epsilon_{\alpha\gamma\nu} \delta_{\beta\mu} + \epsilon_{\beta\gamma\mu} \delta_{\alpha\nu} + \epsilon_{\beta\gamma\nu} \delta_{\alpha\mu} + \epsilon_{\alpha\gamma\mu} \delta_{\beta\nu}) \hat{s}_\gamma(x) \delta(x - x'), \\ [\hat{s}_\alpha(x), \hat{f}_{\beta\gamma}(x')] &= i(\epsilon_{\alpha\beta\rho} \hat{f}_{\gamma\rho}(x) + \epsilon_{\alpha\gamma\rho} \hat{f}_{\beta\rho}(x)) \delta(x - x'), \\ [\hat{s}_\alpha(x), \hat{s}_\beta(x')] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_\gamma(x) \delta(x - x'). \end{aligned}$$

Легко произвести реализацию этой алгебры на языке спиновых матриц, соответствующих спину $s = 1$ ($(s_\alpha)_{\mu\nu} = i\epsilon_{\alpha\mu\nu}$), а именно

$$\hat{f}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\hat{s}_\alpha \hat{s}_\beta + \hat{s}_\beta \hat{s}_\alpha - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \hat{s}^2 \right). \quad (9.11)$$

Так как оператор $\hat{f}_{\alpha\beta}$ представляет собой оператор квадрупольного момента (см. [48]), то, исходя из этого, мы будем считать величину $f_{\alpha\beta}$ в формулах (9.9) матрицей квадрупольного момента спина $s = 1$, причем $\text{Sp } f_{\alpha\beta} = f_{\alpha\alpha} = 0$ (соотношение $f_{\alpha\alpha} = 0$ совместно с подалгеброй (9.9)). Ис-

пользуя СП (9.9), получим уравнения динамики для величин $s_\alpha, f_{\alpha\beta}$ (квадрупольный магнетик):

$$\begin{aligned}\dot{s}_\alpha(x) &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\beta(x)} s_\gamma(x) + 2\varepsilon_{\alpha\beta\rho} f_{\mu\rho}(x) \frac{\delta H}{\delta f_{\mu\beta}(x)}, \\ \dot{f}_{\alpha\beta}(x) &= \frac{1}{2} \frac{\delta H}{\delta f_{\gamma\nu}(x)} (\delta_{\gamma\beta} \varepsilon_{\nu\mu\alpha} + \delta_{\alpha\nu} \varepsilon_{\gamma\beta\mu}) s_\mu(x) + \\ &+ (\varepsilon_{\beta\gamma\rho} f_{\alpha\rho}(x) + \varepsilon_{\alpha\gamma\rho} f_{\beta\rho}(x)) \frac{\delta H}{\delta s_\gamma(x)}.\end{aligned}$$

Из общей алгебры (9.9), (9.10) можно выделить подалгебру динамических переменных $a_{\alpha\beta}, s_\alpha$ (величины $f_{\alpha\beta}$ в эту подалгебру не входят), которая совместна с дополнительным условием $a\tilde{a} = 1$. Эта подалгебра определяет низкочастотную динамику многоподрешеточного магнетика (см. разд.6).

Отметим, что квантово-механическая динамика квадрупольного магнетика со спином $s = 1$ изучалась в [49,50]. Однако там рассматривалась лишь динамика чистых состояний в терминах четырех независимых переменных. Мы же для описания динамики квадрупольного магнетика, с учетом представления (9.11), используем полный набор средних от восьми операторов $\hat{s}_\alpha, \hat{f}_{\alpha\beta}$, составляющих алгебру Ли $SU(3)$. Это согласуется с числом переменных, использованных в [51] при изучении основного состояния и спектра магнетика с одноионной анизотропией для спина $s = 1$.

10. СВЯЗЬ ГАМИЛЬТОНОВА И ЛАГРАНЖЕВА ФОРМАЛИЗМА

Как уже отмечалось ранее, динамические уравнения для магнитных систем с полным спонтанным нарушением симметрии относительно спиновых вращений формулировались с использованием модельных феноменологических лагранжианов [25,42]. В данном разделе мы получим уравнения динамики таких систем в лагранжевом подходе в общем виде, не используя каких-либо модельных предположений.

Лагранжев подход чрезвычайно удобен при формулировке свойств симметрии системы. Вводя в рассмотрение ту или иную симметрию, получим в явном виде интегралы движения для рассматриваемых магнитных систем.

Функция Лагранжа магнитных систем с полным нарушением симметрии относительно спиновых вращений является функционалом матрицы поворота a , а также форм Картана $\omega_\alpha, \omega_{\alpha k}$:

$$L = \int dx \mathcal{L}(a(x), \omega(x), \omega_k(x)). \quad (10.1)$$

В обменном приближении плотность функции Лагранжа $\mathcal{L}$ инвариантна относительно правых однородных поворотов в спиновом пространстве

$$\mathcal{L}(\omega, \omega_k, a) = \mathcal{L}(\omega b, \omega_k b, ab), \quad (10.2)$$

где b — произвольная матрица поворота. Полагая $b = \tilde{a}$, имеем

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\underline{\omega}, \underline{\omega}_k, 1) \equiv \mathcal{L}(\underline{\omega}, \underline{\omega}_k).$$

Введем в рассмотрение величину $\underline{R}_\alpha$, связанную с вариацией матрицы поворота δa соотношением

$$\underline{R}_\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\delta a \tilde{a})_{\gamma\beta}.$$

Вариации форм Картана $\underline{\delta\omega}_\alpha$, $\underline{\delta\omega}_{\alpha k}$ в терминах введенной величины имеют вид

$$\underline{\delta\omega}_\alpha = \dot{\underline{R}}_\alpha + (\underline{R} \times \underline{\omega})_\alpha, \quad \underline{\delta\omega}_{\alpha k} = \nabla_k \underline{R}_\alpha + (\underline{R} \times \underline{\omega}_k)_\alpha. \quad (10.3)$$

С учетом (10.3) запишем полную вариацию действия $W = \int_{t_1}^{t_2} L dt$:

$$\begin{aligned} \delta W = & \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\underline{R}_\alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha} \right) + \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{L} \delta t) \right\} + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \underline{R}_\alpha \left\{ \left(\underline{\omega} \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}} \right)_\alpha + \left(\underline{\omega}_k \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_k} \right)_\alpha - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha} - \nabla_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_{\alpha k}} \right\}. \end{aligned}$$

Полагая $\delta t = 0$ и $\delta a(t)|_{t_1} = \delta a(t)|_{t_2} = 0$, из принципа стационарного действия получим уравнения Лагранжа:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha} + \nabla_k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_{\alpha k}} = \left(\underline{\omega} \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}} \right)_\alpha + \left(\underline{\omega}_k \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_k} \right)_\alpha. \quad (10.4)$$

Вблизи реального движения системы вариация действия имеет вид

$$\delta W = G(t_2) - G(t_1), \quad G(t) \equiv \int d^3x \left(\underline{R}_\alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha} + \mathcal{L} \delta t \right). \quad (10.5)$$

Рассмотрим бесконечно малые преобразования, связанные с временными трансляциями. В этом случае $\delta W = 0$ (так как L не зависит явно от вре-

мени t) и $\underline{R}_\alpha = -\underline{\omega}_\alpha \delta t$. Поэтому из (10.5) следует закон сохранения энергии

$$H = \int d^3x \left(-\mathcal{L} + \underline{\omega}_\alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha} \right) \equiv \int d^3x \varepsilon(x). \quad (10.6)$$

При бесконечно малых пространственных трансляциях $\delta W = 0$, $\underline{R}_\alpha = -\underline{\omega}_{\alpha k} \delta x_k$. Соответствующий интеграл движения — импульс P_k — имеет вид

$$P_k = - \int d^3x \underline{\omega}_{\alpha k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_\alpha}.$$

Рассмотрим бесконечно малые спиновые вращения. При этом $\delta a_{\gamma\lambda} = a_{\gamma\rho} \varepsilon_{\rho\lambda\sigma} \delta\varphi_\sigma$ и $\underline{R}_\alpha = -a_{\alpha\beta} \delta\varphi_\beta$. Соответствующая сохраняющаяся величина — спин S_α в терминах функции Лагранжа имеет вид

$$S_\alpha = - \int d^3x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega_\alpha}.$$

Ввиду соотношения (10.6), плотность энергии ε связана с плотностью функции Лагранжа равенством

$$\varepsilon(s, \omega_k, a) = -\mathcal{L}(\omega(s, \omega_k), \omega_k, a) - s_\alpha \omega_\alpha(s, \omega_k),$$

откуда следуют формулы

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \right)_{\omega_k} = -\omega_\alpha, \quad \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \right)_s = - \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega_{\alpha k}} \right)_\omega = j_{\alpha k}.$$

Поэтому уравнения (10.4) эквивалентны системе уравнений

$$\dot{a}_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta} \varepsilon_{\rho\beta\lambda} \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\lambda}, \quad \dot{s}_\alpha = - \nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}},$$

полученных ранее в рамках гамильтонова подхода.

При бесконечно малых левых спиновых вращениях $\delta a_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\mu\rho} \delta\varphi_\rho a_{\mu\beta}$ и $\underline{R}_\alpha = -\delta\varphi_\alpha$. Если функция Лагранжа одновременно инвариантна относительно правых и левых спиновых вращений, то, согласно (10.2) и соотношения

$$\mathcal{L}(\omega, \omega_k, a) = \mathcal{L}(b\omega, b\omega_k, ba),$$

имеет место равенство

$$\left(\underline{\omega} \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}} \right)_{\alpha} + \left(\underline{\omega}_k \times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_k} \right)_{\alpha} = 0,$$

и в рассматриваемой магнитной системе, помимо спина S_{α} , сохраняется также величина

$$S_{\alpha} = - \int d^3x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \underline{\omega}_{\alpha}}.$$

В качестве конкретного примера феноменологического лагранжиана магнитных систем с полным спонтанным нарушением симметрии приведем лагранжиан, предложенный в работе [25]:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (a_{\alpha\beta} \underline{\omega}_{\alpha} \underline{\omega}_{\beta} + 2b_{\alpha} \underline{\omega}_{\alpha} - c_{\alpha i, \beta k} \underline{\omega}_{\alpha i} \underline{\omega}_{\beta k} - 2d_{\alpha k} \underline{\omega}_{\alpha k}),$$

где $a_{\alpha\beta}$, b_{α} , $c_{\alpha i, \beta k}$, $d_{\alpha k}$ — некоторые феноменологические постоянные. Конкретная структура этих постоянных, соответствующая различным магнитным средам, приведена в [42].

11. МАГНИТОУПРУГИЕ СИСТЕМЫ

В разд. 1—5 мы рассмотрели алгебру СП переменных классической сплошной среды и, в качестве частных случаев, подалгебры этой общей алгебры, а также соответствующую этим скобкам динамику. Аналогичное рассмотрение проведено в разд. 6—9 для ряда магнитоупорядоченных систем. В данном разделе будут изучены магнитоупругие системы, в число динамических переменных которых входят как переменные, соответствующие сплошным средам ($u_i(x)$, $\pi_i(x)$, $\sigma(x)$, $\psi(x)$), так и переменные, соответствующие магнетизму ($s_{\alpha}(x)$, $a_{\alpha\beta}(x)$).

Представим плотность кинематической части лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = \pi_i^*(x) b_{ij}^{-1}(x) \dot{u}_j(x) - \sigma(x) \dot{\psi}(x) - s_{\alpha}(x) \dot{\omega}_{\alpha}(x), \quad (11.1)$$

где

$$\pi_i^* = \pi_i - \sigma \nabla_i \psi - s_{\alpha} \omega_{\alpha i}.$$

Для формулы (11.1) могут быть сделаны те же пояснения, что и для формулы (2.6). Именно последнее слагаемое в (11.1) представляет собой плотность кинематической части лагранжиана для магнитных систем. Соответственно плотность импульса π_i является генератором пространственных трансляций в пространстве переменных u_i , π_i , σ , ψ , s_{α} , $a_{\alpha\beta}$, плотность импульса $\pi_i^{\sigma} = \sigma \nabla_i \psi$ — в пространстве переменных σ , ψ и плотность

импульса $\pi_i^s = s_\alpha \omega_{\alpha i}$ — в пространстве переменных $s_\alpha, a_{\alpha\beta}$ (см. (6.17)). Поэтому плотность импульса, связанная с трансляциями в пространстве переменных u_i, π_i , имеет вид

$$\pi_i^* = \pi_i - \sigma \nabla_i \psi - s_\alpha \omega_{\alpha i},$$

откуда и следует структура плотности кинематической части (11.1). Для получения СП переменных магнитоупругой среды перепишем плотность кинематической части лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = p_j(x) \dot{u}_j(x) - \sigma(x) \dot{\psi}(x) - s_\alpha(x) \omega_\alpha(x),$$

где

$$p_j = (\pi_i - \sigma \nabla_i \psi - s_\alpha \omega_{\alpha i}) b_{ij}^{-1} \equiv \pi_i^* b_{ij}^{-1}. \quad (11.2)$$

Тогда, рассматривая вариации (2.7), (6.4), (6.6), оставляющие кинематическую часть лагранжиана инвариантной, найдем СП (2.10), (6.8), (6.12), в которых теперь обобщенный импульс p_j определяется формулой (11.2).

Из формул

$$\{\pi_i^*(x), \psi(x')\} = \{\pi_i^*(x), \sigma(x')\} = \{\pi_i^*(x), s(x')\} = \{\pi_i^*(x), a(x')\} = 0$$

и СП (6.18) следуют соотношения (2.11) и СП

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), a_{\alpha\beta}(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i a_{\alpha\beta}(x), \\ \{\pi_i(x), s_\alpha(x')\} &= -s_\alpha(x) \nabla_i \delta(x - x'). \end{aligned}$$

В свою очередь, из формул

$$\{p_i(x), p_j(x')\} = 0,$$

$$\{\pi_i^b(x), \pi_k^b(x')\} = \pi_k^b(x) \nabla_i \delta(x - x') - \pi_i^b(x') \nabla_k \delta(x - x'), \quad b = (\sigma, s)$$

найдем СП (2.12). Объединяя полученные результаты вместе, запишем алгебру СП динамических переменных магнитоупругой среды в виде

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), & \{\pi_i(x), \psi(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \psi(x), \\ \{\sigma(x), \psi(x')\} &= \delta(x - x'), & \{u_i(x), \pi_k(x')\} &= b_{ik}(x) \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla_i \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), a_{\alpha\beta}(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i a_{\alpha\beta}(x), \\ \{\pi_i(x), s_\alpha(x')\} &= -s_\alpha(x) \nabla_i \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), a_{\beta\gamma}(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_{\beta\gamma}(x) \delta(x - x') \end{aligned} \quad (11.3)$$

(здесь выписаны только нетривиальные СП). Как и в случае сплошных сред, переменная ψ будет считаться циклической. Предполагая, что гамильтониан системы инвариантен относительно пространственных трансляций, представим его в виде

$$H = \int d^3x \varepsilon(x), \quad \varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \pi_i(x'), b_{ij}(x'), s_\alpha(x'), a_{\alpha\beta}(x')). \quad (11.4)$$

Уравнения движения для переменных магнитоупругой среды, соответствующие (11.3), (11.4), имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_i \left(\sigma(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_i(x)} \right), \quad \dot{b}_{ij}(x) = -b_{ij}(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_j(x)}, \\ \dot{\pi}_i(x) &= -\pi_j(x) \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j(x)} - \nabla_j \left(\pi_i(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_j(x)} \right) - b_{ki}(x) \nabla_j \frac{\delta H}{\delta b_{kj}(x)} - \sigma(x) \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \sigma(x)} - \\ &\quad - s_\alpha(x) \nabla_i \frac{\delta H}{\delta s_\alpha(x)} + \frac{\delta H}{\delta a_{\alpha\beta}(x)} \nabla_i a_{\alpha\beta}(x), \\ \dot{s}_\alpha(x) &= -\nabla_i \left(s_\alpha(x) \frac{\delta H}{\delta \pi_i(x)} \right) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\delta H}{\delta s_\beta(x)} s_\gamma(x) + \frac{\delta H}{\delta a_{\rho\beta}(x)} a_{\rho\gamma}(x) \right), \\ \dot{a}_{\alpha\beta}(x) &= -\frac{\delta H}{\delta \pi_i(x)} \nabla_i a_{\alpha\beta}(x) + a_{\alpha\rho}(x) \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\gamma(x)}. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Структура уравнений (11.5) значительно упрощается в длинноволновом пределе, когда пространственные неоднородности динамических переменных малы. Считая, что плотность энергии является функцией величин σ , π_i , b_{ik} , s_α , $a_{\alpha\beta}$, $\nabla_k a_{\alpha\beta}$ (или, что то же самое, не $\nabla a_{\alpha\beta}$, а левой формы Картана $\omega_{\alpha k}$), получим динамические уравнения в локальной форме. Если предположить, что плотность энергии обладает свойством инвариантности относительно спиновых вращений, $\{S_\alpha, \varepsilon(x)\} = 0$, то мы получим дифференциальный закон сохранения плотности спина $s_\alpha(x)$ с потоком $j_{\alpha k}$, определяемым формулой (1.17). Вычисление СП в (1.17) дает

$$\dot{s}_\alpha = -\nabla_k j_{\alpha k}, \quad j_{\alpha k} = s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}. \quad (11.6)$$

Дифференциальный закон сохранения плотности энергии имеет вид (1.18). На основе алгебры (11.3) найдем

$$\dot{\varepsilon} = -\nabla_k q_k, \quad q_k = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \right) +$$

$$+ \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\alpha}} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_i} \right) + b_{ij} \frac{\partial \epsilon}{\partial b_{ik}} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_j}. \quad (11.7)$$

Наконец, если плотность энергии $\epsilon(x)$ обладает свойством трансляционной инвариантности, $\{P_i, \epsilon(x)\} = \nabla_i \epsilon(x)$, то отсюда получим дифференциальный закон сохранения плотности импульса (1.16). Вычисление СП приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_i &= -\nabla_k t_{ik}, \quad t_{ik} = p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} + b_{ji} \frac{\partial \epsilon}{\partial b_{jk}}, \\ p &\equiv -\epsilon + \sigma \frac{\partial \epsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_l} + s_{\alpha} \frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\alpha}}. \end{aligned} \quad (11.8)$$

Здесь t_{ik} — тензор натяжений.

Если плотность энергии $\epsilon(x)$ не зависит от матрицы поворота $a_{\alpha\beta}$, то уравнения движения (11.6)–(11.8) совпадают с соответствующими уравнениями движения в [52], если в последних пренебречь влиянием электромагнитных полей.

Для плотности энергии, инвариантной относительно спиновых вращений, имеем (см. (6.26)):

$$\epsilon(\dots, s, \omega_k, a) = \epsilon(\dots, \underline{s}, \underline{\omega}_k)$$

(мы выписываем зависимость только от переменных, которые меняются при рассматриваемых преобразованиях), и поэтому целесообразно в качестве независимых переменных выбрать правые величины $\underline{s}$, $\underline{\omega}_k$. Тогда, используя СП (11.3), получим уравнения динамики магнитоупругой среды в длинноволновом пределе в виде

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_k} \right), \quad \dot{\pi}_i = -\nabla_k \left(p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} + b_{ji} \frac{\partial \epsilon}{\partial b_{jk}} \right), \\ \dot{b}_{ik} &= -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_j} \right), \quad \dot{s}_{\alpha} = -\nabla_k \left(s_{\alpha} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \right) + \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(s_{\beta} \frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\gamma}} + \omega_{\beta k} \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\gamma k}} \right), \\ \dot{\omega}_{\alpha k} &= -\nabla_k \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\alpha}} + \omega_{\alpha l} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_l} \right) + \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \omega_{\beta k} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\gamma}} + \omega_{\gamma l} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_l} \right), \end{aligned} \quad (11.9)$$

где

$$p \equiv -\epsilon + \sigma \frac{\partial \epsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_l} + s_{\alpha} \frac{\partial \epsilon}{\partial s_{\alpha}}$$

— давление. Полная система уравнений (11.9) определяет динамические свойства магнитоупругой среды в пренебрежении диссипативными процессами.

12. КВАНТОВЫЙ КРИСТАЛЛ

До сих пор мы рассматривали нормальные системы. Теперь мы перейдем к изучению сверхтекучих систем, для которых равновесное состояние является состоянием со спонтанно нарушенной симметрией относительно фазовых преобразований. Вначале мы рассмотрим получение алгебры СП переменных квантового кристалла, затем из этой алгебры выделим подалгебру, отвечающую сверхтекучему ^4He . Далее мы учтем влияние спиновых степеней свободы и опишем динамику квантового спинового кристалла, в основном состоянии которого нарушены инвариантность относительно спиновых вращений, а также трансляционная и фазовая инвариантности. Здесь в качестве подалгебры будет выделена алгебра СП переменных сверхтекучего $^3\text{He}-B$.

Рассмотрим квантовый кристалл. Явление сверхтекучести квантового кристалла [53] связано с возможностью двух видов движения. Первый из них — движение узлов решетки, характерное для твердого тела, второй тип — перенос массы квазичастицами при неподвижных узлах решетки, характерный для сверхтекучей жидкости. Линейные уравнения динамики квантового кристалла в феноменологическом подходе были получены в [53], их нелинейному обобщению посвящены работы [54,55]. Мы получим нелинейные уравнения динамики квантового кристалла, основываясь на гамильтоновом подходе.

Переменными, описывающими нарушение фазовой и трансляционной инвариантности равновесного состояния квантового кристалла, являются сверхтекучая фаза $\phi(x)$ и вектор смещения узлов решетки $u_i(x)$ в конфигурационном пространстве. Поэтому плотность энергии $\epsilon(x)$ в общем случае представляет собой функционал переменных: сверхтекучей фазы $\phi(x)$, вектора смещения и плотностей энтропии $\sigma(x)$, массы $\rho(x)$, импульса $\pi_i(x)$:

$$\epsilon(x) = \epsilon(x; \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), \phi(x'), u_i(x')). \quad (12.1)$$

Получим теперь СП динамических переменных системы. Предварительно сделаем следующее замечание. Как известно [56], в механике сплошных сред переменные $\rho(x)$ и $u_i(x)$ не являются независимыми, а связаны соотношением

$$\rho = \tilde{\rho} \det \| \delta_{ij} - \nabla_j u_i \|, \quad (12.2)$$

где $\tilde{\rho}$ — плотность недеформированного вещества. Однако, поскольку мы рассматриваем квантово-кристаллическую фазу, для которой число атомов и число узлов решетки не совпадают [53], переменные $\rho(x)$ и $u_i(x)$ должны рассматриваться как независимые, для которых соотношение (12.2) уже не выполняется. Поэтому и СП для этих переменных также должны задаваться независимо.

Запишем плотность кинематической части лагранжиана в виде

$$\mathcal{L}_k(x) = \pi_i^* b_{ij}^{-1} \dot{u}_j(x) - \sigma(x) \dot{\psi}(x) - \rho(x) \dot{\phi}(x), \quad (12.3)$$

где

$$\pi_i^* = \pi_i - \sigma \nabla_i \psi(x) - \rho \nabla_i \phi.$$

Выражение (12.3) строится аналогично тому, как это делается в случае классических сплошных сред (см. пояснение к включению слагаемого $\sigma\dot{\psi}$). Именно последнее слагаемое в (12.3) представляет собой учет влияния сверхтекучести; соответственно, в плотности импульса π_i^* , связанной с пространственными трансляциями в пространстве переменных u_i , π_i^* , необходимо вычесть дополнительно слагаемое $\rho \nabla_i \phi$. Для получения СП, так же, как и для классических сплошных сред, нужно рассмотреть вариации (2.7) с обобщенным импульсом $p_j = \pi_i^* b_{ij}^{-1}$ и, наряду с ними, вариации

$$\delta\rho(x) = 0, \quad \delta\phi(x) = g(x).$$

Этим вариациям соответствует генератор

$$G = \int d^3x (p_i f_i - \sigma \chi - \rho g).$$

Производя дальнейшие вычисления, аналогичные вычислениям в разд.2, придем к следующей алгебре СП переменных квантового кристалла:

$$\{\pi_i(x), u_k(x')\} = -(\delta_{ik} - \nabla_i u_k(x)) \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \sigma(x')\} = -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'),$$

$$\{\pi_i(x), \rho(x')\} = -\rho(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \phi(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i \phi(x),$$

$$\{\pi_i(x), \psi(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i \psi(x), \quad \{\sigma(x), \psi(x')\} = \{\rho(x), \phi(x')\} = \delta(x - x'),$$

$$\{\pi_i(x), \pi_k(x')\} = \pi_k(x) \nabla'_i \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'). \quad (12.4)$$

Переменная ψ всюду далее будет считаться циклической. Отметим, что, в силу свойства инвариантности $\varepsilon(x)$ относительно глобальных фазовых преобразований и пространственных трансляций, плотность энергии $\varepsilon(x)$

зависит не от самих величин $\phi(x)$, $u_i(x)$, а только от их производных $\nabla_i \phi \equiv p_i$, $\nabla_k u_i$ (или, в последнем случае, от величин $b_{ik} = \delta_{ik} - \nabla_k u_i$):

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x, \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), p_i(x'), b_{ik}(x')). \quad (12.5)$$

Вектор p имеет смысл сверхтекучего импульса. Поэтому удобно в качестве динамических переменных, наряду с остальными переменными, выбрать непосредственно величины p_i и b_{ik} . Используя СП (12.4), получим нелокальные динамические уравнения квантового кристалла в виде

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\delta H}{\delta \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\delta H}{\delta \pi_k} + \frac{\delta H}{\delta p_k} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\sigma \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \sigma} - \pi_j \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} - \nabla_j \left(\pi_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} \right) - \rho \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \rho} - p_i \nabla_j \frac{\delta H}{\delta p_j} - b_{ki} \nabla_j \frac{\delta H}{\delta b_{kj}}, \\ \dot{p}_i &= -\nabla_i \left(p_j \frac{\delta H}{\delta \pi_j} + \frac{\delta H}{\delta \rho} \right); \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\delta H}{\delta \pi_j} \right). \end{aligned} \quad (12.6)$$

Структура уравнений (12.6) значительно упрощается в длинноволновом пределе, когда пространственные неоднородности динамических переменных малы. Считая, что плотность энергии является функцией величин σ , ρ , π_i , p_i , b_{ik} , запишем динамические уравнения в локальной форме. Воспользуемся для этого результатами первого раздела. Для плотности энергии, удовлетворяющей условию $\{M, \varepsilon(x)\} = 0$, $\int d^3x \rho(x)$, получим дифференциальный закон сохранения плотности массы (1.15). Используя (12.4), для плотности потока массы j_k найдем

$$j_k = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}. \quad (12.7)$$

Вычисление СП в (1.16), (1.18) приводит к следующим выражениям для плотностей потоков энергии q_k и импульса t_{ik} :

$$\begin{aligned} q_k &= \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} \right) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + p_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} \right) + b_{ij} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{ik}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j}, \\ t_{ik} &= p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + b_{ji} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{jk}}, \quad p \equiv -\varepsilon + \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}. \end{aligned} \quad (12.8)$$

Таким образом, уравнения динамики квантовых кристаллов в длинноволновом пределе имеют вид

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma} &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right), \\
\dot{\pi}_i &= -\nabla_k \left(p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + b_{ji} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{jk}} \right), \\
\dot{p}_i &= -\nabla_i \left(p_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right), \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j} \right).
\end{aligned} \tag{12.9}$$

Эти уравнения совпадают с уравнениями, полученными ранее феноменологическим путем в [54] и на основе микроскопического подхода в [55].

Отметим, что формулы (12.8) для плотностей потоков могут быть записаны в компактной форме, если ввести плотность термодинамического потенциала

$$\omega = Y_a \zeta_a - \sigma, \quad a = (0, i, 4); \quad \zeta_a = (\varepsilon, \pi_i, \rho), \tag{12.10}$$

где Y_a — термодинамические силы, определенные согласно равенствам

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} \equiv \frac{1}{Y_0}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \equiv -\frac{Y_i}{Y_0}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \equiv -\frac{Y_4}{Y_0}. \tag{12.11}$$

Из формул (12.10), (12.11) следует, что

$$\frac{\partial \omega}{\partial Y_a} = \zeta_a,$$

и, так как $\omega = \omega(Y_a, p_i, b_{ik})$, второе начало термодинамики имеет вид

$$d\omega = \zeta_a dY_a + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \omega}{\partial b_{ik}} db_{ik}. \tag{12.12}$$

С учетом (12.8), (12.12) представим плотности потоков в виде

$$\zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{\omega Y_k}{Y_0} + \frac{\partial \omega}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_4 + Y_i p_i}{Y_0} + \frac{\partial \omega}{\partial b_{jk}} \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{b_{jl} Y_l}{Y_0}. \tag{12.13}$$

Здесь $\zeta_{0k} \equiv q_k$, $\zeta_{ik} \equiv t_{ik}$, $\zeta_{4k} \equiv j_k$. Динамика плотностей аддитивных интегралов движения и параметров, описывающих нарушенную симметрию, определяется, согласно (12.9), (12.13), уравнениями

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k \zeta_{ak}, \quad \dot{p}_i = \nabla_i \left(\frac{Y_4 + Y_j p_j}{Y_0} \right), \quad \dot{b}_{ik} = \nabla_k \left(b_{ij} \frac{Y_j}{Y_0} \right).$$

С целью интерпретации термодинамических сил Y_a запишем основное термодинамическое тождество для плотности энергии $\varepsilon = \varepsilon(\sigma, \rho, \pi_k, p_i, b_{ik})$:

$$d\varepsilon = Td\sigma + \mu dp + v_k d\pi_k + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{ik}} db_{ik}, \quad (12.14)$$

где T — температура, μ — химический потенциал, v_k — нормальная скорость. Из (12.11), (12.14) следует, что

$$T = \frac{1}{Y_0}, \quad v_i = -\frac{Y_i}{Y_0}, \quad \mu = -\frac{Y_4}{Y_0}.$$

Пусть рассматриваемая система обладает свойством галилеевской инвариантности. Тогда термодинамический потенциал ω зависит лишь от следующих комбинаций термодинамических сил Y_a [55]:

$$\omega = \omega(Y'_0, Y'_k, Y'_4, b_{ik}),$$

$$Y'_0 = Y_0, \quad Y'_k = Y_k + Y_0 \frac{p_k}{m}, \quad Y'_4 = Y_4 + Y_k p_k + Y_0 \frac{p^2}{2m}. \quad (12.15)$$

С учетом (12.15) для плотностей потоков получим выражения

$$\begin{aligned} j_k &= \frac{1}{m} \frac{\partial \omega}{\partial Y'_k} + \frac{p_k}{m} \frac{\partial \omega}{\partial Y'_4}, \\ t_{ik} &= -\frac{\omega}{Y_0} \delta_{ik} + \frac{p_i p_k}{m} \frac{\partial \omega}{\partial Y'_4} + \frac{p_i}{m} \frac{\partial \omega}{\partial Y'_k} - \frac{Y_k}{Y_0} \frac{\partial \omega}{\partial Y'_i} + \frac{b_{ji}}{Y_0} \frac{\partial \omega}{\partial b_{jk}}, \\ q_k &= -\frac{Y_4 + Y_l p_l}{m Y_0} \pi_k - \frac{Y_k}{Y_0^2} \left(\sigma - Y_l \frac{\partial \omega}{\partial Y'_l} \right) - \frac{b_{jl} Y_l}{Y_0^2} \frac{\partial \omega}{\partial b_{jk}}. \end{aligned} \quad (12.16)$$

Формулы (12.16) совпадают с аналогичными выражениями в [55].

13. СВЕРХТЕКУЧИЙ ${}^4\text{He}$

В равновесном состоянии сверхтекучего ${}^4\text{He}$ нарушена фазовая инвариантность. Плотность энергии $\varepsilon(x)$ является функционалом плотностей энтропии $\sigma(x)$, массы $\rho(x)$, импульса $\pi_i(x)$ и сверхтекучей фазы $\phi(x)$:

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), \phi(x')). \quad (13.1)$$

Алгебра динамических переменных сверхтекучего ${}^4\text{He}$ образует подалгебру алгебры (12.4) переменных квантового кристалла и определяется формулами:

$$\begin{aligned}
\{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x-x'), & \{\pi_i(x), \rho(x')\} &= -\rho(x) \nabla_i \delta(x-x'), \\
\{\pi_i(x), \phi(x')\} &= \delta(x-x') \nabla_i \phi(x), & \{\pi_i(x), \psi(x')\} &= \delta(x-x') \nabla_i \psi(x), \\
\{\sigma(x), \psi(x')\} &= \{\rho(x), \phi(x')\} = \delta(x-x'), \\
\{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla'_i \delta(x-x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x-x').
\end{aligned} \tag{13.2}$$

Приведем здесь интерпретацию величин x_i и u_i , введенных во втором разделе. Поскольку там речь шла о нормальной системе, то величины x_i и u_i имели соответственно смысл эйлеровых координат и вектора смещения частиц среды. В случае сверхтекучего ⁴Не требуется сделать пояснение, к какой компоненте относятся эти переменные. Прежде всего, нормальная скорость определяется формулой

$$v_i(x) = \frac{\delta H}{\delta \pi_i(x)}. \tag{13.3}$$

Уравнение движения для вектора смещения было получено нами ранее (см. (2.18)), и, с учетом (13.3), оно имеет вид

$$\dot{u}_i = b_{ij} v_j. \tag{13.4}$$

Определим функцию $x = x(\xi, t)$ неявным образом с помощью равенства

$$x_i(\xi, t) = \xi_i + u_i(x(\xi, t), t). \tag{13.5}$$

Дифференцирование обеих частей формулы (13.5) по времени приводит к соотношению

$$\dot{x}_i = b_{ij} \dot{x}_j. \tag{13.6}$$

Отсюда, сравнивая равенства (13.4) и (13.6), получим

$$b_{ij} \dot{x}_j = b_{ij} v_j,$$

и, следовательно,

$$\dot{x}_j = v_j.$$

Таким образом, заключаем, что функция $x_i(\xi, t)$, которая определяется соотношением (13.5), и величина u_i представляют собой, соответственно, эйлерову координату и вектор смещения частиц нормальной компоненты.

Если переменная ψ — циклическая, то локальные уравнения динамики, соответствующие СП (13.2), имеют вид

$$\begin{aligned}\dot{\sigma} &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_k \left(p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right), \quad \dot{p}_i = -\nabla_i \left(p_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right),\end{aligned}\quad (13.7)$$

где

$$p = -\varepsilon + \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}$$

— давление и $p_i = \nabla_i \phi$ — сверхтекущий импульс.

Отметим следующее интересное обстоятельство. Если плотность энергии $\varepsilon(x)$ содержит зависимость от переменной ψ , то в правой части уравнения движения для плотности энтропии появляется дополнительный член. Действительно, в предположении, что

$$\varepsilon(x; \dots, \psi(x')) = \varepsilon(\dots, \nabla \psi(x)),$$

и, следовательно,

$$\frac{\delta H}{\delta \psi} = -\nabla_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k \psi},$$

получим

$$\dot{\sigma} = -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nabla_k \psi} \right).$$

Второй член в скобках может быть не связан с движением нормальной компоненты, и в выражении для плотности потока энтропии, как следствие, появляется слагаемое, обусловленное сверхтекучим движением.

14. КВАНТОВЫЙ СПИНОВЫЙ КРИСТАЛЛ

При рассмотрении динамики квантовых кристаллов мы не учитывали влияние спиновых степеней свободы, что может быть существенным для квантового твердого ${}^3\text{He}$. Имея в виду, что в сверхтекучих жидких фазах ${}^3\text{He}$ имеет место спонтанное нарушение симметрии относительно однородных спиновых вращений, мы рассмотрим случай полного нарушения спиновой инвариантности (параметр, описывающий такое нарушение, — вещественная матрица поворота), что соответствует B -фазе ${}^3\text{He}$. Иными словами, мы рассмотрим квантовый спиновый кристалл, в равновесном состоянии которого одновременно нарушены фазовая, трансляционная и спиновая инвариантности [28].

В случае, если в основном состоянии не происходит полного нарушения симметрии относительно спиновых вращений, то спиновая динамика квантового кристалла описывается в терминах только плотности спина в рамках хорошо известного уравнения Ландау — Лифшица с конвекционным членом [52].

Динамическими переменными квантового спинового кристалла с нарушенной симметрией относительно спиновых вращений являются плотности энтропии $\sigma(x)$, массы $\rho(x)$, импульса $\pi_i(x)$ и спина $s_\alpha(x)$, а также ортогональная матрица поворота $a_{\alpha\beta}(x)$, сверхтекучая фаза $\phi(x)$ и вектор смещения $u_i(x)$. Поэтому плотность энергии $\varepsilon(x)$ в общем случае представляет собой функционал этих переменных:

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), s_\alpha(x'), a_{\alpha\beta}(x'), \phi(x'), u_i(x')). \quad (14.1)$$

Плотность кинематической части лагранжиана квантового спинового кристалла записывается в виде (см. (6.3), (12.3))

$$\mathcal{L}_k(x) = \pi_i^*(x) b_{ij}^{-1}(x) \dot{u}_j(x) - \sigma(x) \dot{\psi}(x) - \rho(x) \dot{\phi}(x) - s_\alpha(x) \omega_\alpha(x), \quad (14.2)$$

где

$$\pi_i^* = \pi_i - \sigma \nabla_i \psi - \rho \nabla_i \phi - s_\alpha \omega_{\alpha i}.$$

Плотности кинематической части лагранжиана (14.2) соответствует следующая алгебра СП динамических переменных:

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), u_k(x')\} &= -(\delta_{ik} - \nabla_i u_k(x)) \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \psi(x')\} = \nabla_i \psi(x) \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \rho(x')\} = -\rho(x) \nabla_i \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), s_\alpha(x')\} &= -s_\alpha(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), a_{\alpha\beta}(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i a_{\alpha\beta}(x), \\ \{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla'_i \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \phi(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \phi(x), \quad \{\rho(x), \phi(x')\} = \{\sigma(x), \psi(x')\} = \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'), \quad \{s_\alpha(x), a_{\beta\gamma}(x')\} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_{\beta\gamma}(x) \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (14.3)$$

Отметим, что в силу свойства инвариантности $\varepsilon(x)$ относительно глобальных фазовых преобразований и пространственных трансляций плотность энергии $\varepsilon(x)$ зависит не от самих величин $\phi(x)$, $u_i(x)$, а только от их производных $\nabla_i \phi \equiv p_i$, $\nabla_k u_i$ (или, в последнем случае, от величин $b_{ik} \equiv \delta_{ik} - \nabla_k u_i$):

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), s_\alpha(x'), a_{\alpha\beta}(x'), p_i(x'), b_{ik}(x')). \quad (14.4)$$

Вектор p имеет смысл сверхтекучего импульса. Поэтому удобно в качестве динамических переменных, наряду с остальными переменными, выбрать непосредственно величины p_i и b_{ik} . Используя СП (14.3) и общее функциональное выражение (14.4), получим нелокальные динамические уравнения квантового спинового кристалла в виде:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\delta H}{\delta \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\delta H}{\delta \pi_k} + \frac{\delta H}{\delta p_k} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\sigma \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \sigma} - \pi_j \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} - \nabla_j \left(\pi_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} \right) - s_\alpha \nabla_i \frac{\delta H}{\delta s_\alpha} + \\ &+ \frac{\delta H}{\delta a_{\alpha\beta}} \nabla_i a_{\alpha\beta} - \rho \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \rho} - p_i \nabla_j \frac{\delta H}{\delta p_j} - b_{ki} \nabla_j \frac{\delta H}{\delta b_{kj}}, \\ \dot{s}_\alpha &= -\nabla_i \left(s_\alpha \frac{\delta H}{\delta \pi_i} \right) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\delta H}{\delta s_\beta} s_\gamma + \frac{\delta H}{\delta a_{\rho\beta}} a_{\rho\gamma} \right), \end{aligned} \quad (14.5)$$

а также уравнения для параметров, описывающих нарушенную симметрию:

$$\begin{aligned} \dot{a}_{\alpha\beta} &= -\frac{\delta H}{\delta \pi_i} \nabla_i a_{\alpha\beta} + a_{\alpha\rho} \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\gamma}, \\ \dot{p}_i &= -\nabla_i \left(p_j \frac{\delta H}{\delta \pi_j} + \frac{\delta H}{\delta p} \right), \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\delta H}{\delta \pi_j} \right). \end{aligned} \quad (14.6)$$

Приведенные уравнения динамики (14.5), (14.6) и общее функциональное выражение для плотности энергии (14.4) описывают неравновесные свойства квантового спинового кристалла с произвольным характером пространственных неоднородностей. Считая, что плотность энергии является функцией вида

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi_i(x), p_i(x), b_{ik}(x), s_\alpha(x), \omega_{\alpha k}(x)), \quad (14.7)$$

получим динамические уравнения в локальной форме. Используя формулы (1.15)—(1.18), для плотностей потоков массы, спина, энергии и импульса найдем

$$j_k = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}, \quad j_{\alpha k} = s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}},$$

$$q_k = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \right) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \right) +$$

$$+ \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \right) + b_{ij} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{ik}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j}, \quad (14.8)$$

$$t_{ik} = p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} + b_{ji} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{jk}},$$

$$p \equiv -\varepsilon + \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha}.$$

Здесь p — давление. Полагая, что плотность энергии по-прежнему удовлетворяет свойству вращательной инвариантности (6.25) в спиновом пространстве, имеем

$$\varepsilon(\dots, s, \omega_k, a) = \varepsilon(\dots, as, a\omega_k, 1) \equiv \varepsilon(\dots, \underline{s}, \underline{\omega}_k).$$

Поэтому целесообразно в качестве независимых переменных выбрать, наряду с остальными, величины $\underline{s}$, $\underline{\omega}_k$. Тогда, вычисляя плотности потоков в новых переменных с использованием алгебры СП (14.3), получим уравнения динамики квантовых спиновых кристаллов в длинноволновом пределе в виде

$$\dot{\sigma} = -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right),$$

$$\dot{\pi}_i = -\nabla_k \left(p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} + b_{ji} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b_{jk}} \right),$$

$$\dot{s}_\alpha = -\nabla_k \left(s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \right) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(s_\beta \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\gamma} + \omega_{\beta k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\gamma k}} \right), \quad (14.9)$$

где

$$p = -\varepsilon + \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha},$$

и уравнения для параметров, описывающих нарушенную симметрию:

$$\dot{a}_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\gamma} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \omega_{\gamma i} \right) a_{\rho\beta},$$

$$\dot{p}_i = -\nabla_i \left(p_j \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_j} + \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right), \quad \dot{b}_{ik} = -\nabla_k \left(b_{ij} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_j} \right). \quad (14.10)$$

Следствием уравнений (14.9), (14.10) является дифференциальный закон сохранения плотности энергии:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon} = -\nabla_k \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_k} \left(\sigma \frac{\partial \epsilon}{\partial \sigma} + \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} + \pi_l \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_l} + s_\alpha \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\alpha} \right) + \frac{\partial \epsilon}{\partial p_k} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} + p_i \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_i} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial s_\alpha} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_i} \right) + b_{ij} \frac{\partial \epsilon}{\partial b_{ik}} \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_j} \right]. \end{aligned} \quad (14.11)$$

Для компактной записи плотностей потоков (14.8) введем термодинамический потенциал ω :

$$\omega = Y_a \zeta_a - \sigma, \quad a = (0, i, \alpha, 4); \quad \zeta_a = (\epsilon, \pi_i, s_\alpha, \rho), \quad (14.12)$$

где Y_a — термодинамические силы, определяемые формулами

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \sigma} \equiv \frac{1}{Y_0}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial \pi_i} \equiv -\frac{Y_i}{Y_0}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial s_\alpha} \equiv -\frac{Y_\alpha}{Y_0}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \equiv -\frac{Y_4}{Y_0} \quad (14.13)$$

($\omega' = -\omega/Y_0$ — потенциал Гиббса). С учетом (14.12), (14.13) имеем

$$\frac{\partial \omega}{\partial Y_a} = \zeta_a,$$

и второе начало термодинамики для потенциала ω записывается в виде

$$d\omega = \zeta_a dY_a + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \omega}{\partial b_{ik}} db_{ik} + \frac{\partial \omega}{\partial \omega_{\alpha k}} d\omega_{\alpha k}. \quad (14.14)$$

Из (14.8), (14.14) следует, что

$$\begin{aligned} \zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{\omega Y_k}{Y_0} + \frac{\partial \omega}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_4 + Y_i p_i}{Y_0} + \frac{\partial \omega}{\partial b_{jk}} \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{b_{jl} Y_l}{Y_0} + \\ + \frac{\partial \omega}{\partial \omega_{\alpha k}} \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_\alpha + Y_l \omega_{\alpha l}}{Y_0}. \end{aligned} \quad (14.15)$$

Динамика плотностей аддитивных интегралов движения ζ_a и параметров, описывающих нарушенную симметрию, определяется уравнениями

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k \zeta_{ak}, \quad \dot{p}_i = \nabla_i \left(\frac{Y_4 + Y_j p_j}{Y_0} \right), \quad \dot{b}_{ik} = \nabla_k \left(b_{ij} \frac{Y_j}{Y_0} \right),$$

$$\dot{a}_{\alpha\beta} = \frac{1}{Y_0} (Y_i \nabla_i a_{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\rho\gamma} Y_\gamma a_{\rho\beta}).$$

С целью интерпретация термодинамических сил Y_a запишем основное термодинамическое тождество для плотности энергии

$$d\varepsilon = T d\sigma + \mu dp + v_k d\pi_k + h_\alpha ds_\alpha + \frac{\partial\varepsilon}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial\varepsilon}{\partial b_{ik}} db_{ik} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} d\omega_{\alpha k}. \quad (14.16)$$

Здесь h_α — подмагничивающее поле. Из (14.13), (14.16) получим

$$T = \frac{1}{Y_0}, \quad v_i = -\frac{Y_i}{Y_0}, \quad \mu = -\frac{Y_4}{Y_0}, \quad h_\alpha = -\frac{Y_\alpha}{Y_0}.$$

Пусть рассматриваемая система обладает свойством галилеевской инвариантности. Тогда термодинамический потенциал ω зависит лишь от следующих комбинаций термодинамических сил Y_a [55]:

$$\omega = \omega(Y'_0, Y'_k, Y'_\alpha, Y'_4, b_{ik}, \omega_{\alpha k}),$$

$$Y'_0 = Y_0, \quad Y'_k = Y_k + Y_0 \frac{p_k}{m}, \quad Y'_\alpha = Y_\alpha, \quad Y'_4 = Y_4 + Y_k p_k + Y_0 \frac{p^2}{2m}.$$

Замечая, что

$$\frac{\partial\omega}{\partial p_l} = \frac{Y_0}{m} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_l} + \left(Y_l + Y_0 \frac{p_l}{m} \right) \frac{\partial\omega}{\partial Y'_4}, \quad \frac{\partial\omega}{\partial Y'_l} + p_l \frac{\partial\omega}{\partial Y'_4},$$

найдем выражения для плотностей потоков

$$j_k = \frac{1}{m} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_k} + \frac{p_k}{m} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_4}, \quad j_{\alpha k} = -\frac{Y_k}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_\alpha} + \frac{1}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial \omega_{\alpha k}},$$

$$t_{ik} = -\frac{\omega}{Y_0} \delta_{ik} + \frac{p_i p_k}{m} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_4} + \frac{p_i}{m} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_k} - \frac{Y_k}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial Y'_i} + \frac{\omega_{\alpha i}}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial \omega_{\alpha k}} + \frac{b_{ji}}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial b_{jk}},$$

$$q_k = -\frac{Y_4 + Y_l p_l}{m Y_0} \pi_k - \frac{Y_k}{Y_0^2} \left(\sigma - Y_l \frac{\partial\omega}{\partial Y'_l} \right) - \frac{b_{jl} Y_l}{Y_0^2} \frac{\partial\omega}{\partial b_{jk}} - \frac{Y_\alpha + Y_l \omega_{\alpha l}}{Y_0^2} \frac{\partial\omega}{\partial \omega_{\alpha k}}.$$

При этом второй закон термодинамики запишется в виде

$$T d\sigma = d\varepsilon + \frac{Y'_k}{Y_0} d\pi_k + \frac{Y'_\alpha}{Y_0} ds_\alpha + \frac{Y'_4}{Y_0} d\rho - \frac{1}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial \omega_{\alpha k}} d\omega_{\alpha k} - \frac{1}{Y_0} \frac{\partial\omega}{\partial b_{ik}} db_{ik}.$$

15. СВЕРХТЕКУЧИЙ $^3\text{He}-B$

В случае сверхтекучей B -фазы ^3He происходит спонтанное нарушение симметрии относительно фазовых преобразований и спиновых вращений. Параметрами, описывающими это нарушение, служат сверхтекучая фаза $\phi(x)$ и ортогональная матрица поворота $a_{\alpha\beta}(x)$. Соответственно, плотность энергии является функционалом вида

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(x; \sigma(x'), \rho(x'), \pi_i(x'), \phi(x'), s_\alpha(x'), a_{\alpha\beta}(x')). \quad (15.1)$$

СП динамических переменных сверхтекучей B -фазы ^3He образуют подалгебру алгебры (14.3) СП квантового спинового кристалла. Для них имеем

$$\begin{aligned} \{\pi_i(x), \psi(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \psi(x), \\ \{\pi_i(x), \sigma(x')\} &= -\sigma(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), \rho(x')\} = -\rho(x) \nabla_i \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), s_\alpha(x')\} &= -s_\alpha(x) \nabla_i \delta(x - x'), \quad \{\pi_i(x), a_{\alpha\beta}(x')\} = \delta(x - x') \nabla_i a_{\alpha\beta}(x), \\ \{\pi_i(x), \phi(x')\} &= \delta(x - x') \nabla_i \phi(x), \quad \{\rho(x), \phi(x')\} = \{\sigma(x), \psi(x')\} = \delta(x - x'), \\ \{s_\alpha(x), s_\beta(x')\} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\gamma(x) \delta(x - x'), \quad \{s_\alpha(x), a_{\beta\gamma}(x')\} = \varepsilon_{\alpha\gamma\rho} a_{\beta\rho}(x) \delta(x - x'), \\ \{\pi_i(x), \pi_k(x')\} &= \pi_k(x) \nabla'_i \delta(x - x') - \pi_i(x') \nabla_k \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (15.2)$$

В силу глобальной фазовой инвариантности зависимость плотности энергии (15.1) от фазы $\phi(x)$ выражается только посредством величины $p_i \equiv \nabla_i \phi$. Нелокальные уравнения динамики для плотностей аддитивных интегралов движения сверхтекучего $^3\text{He}-B$ имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(x) &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\delta H}{\delta \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\delta H}{\delta \pi_k} + \frac{\delta H}{\delta p_k} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\pi_j \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} - \nabla_j \left(\pi_i \frac{\delta H}{\delta \pi_j} \right) - \sigma \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \sigma} - s_\alpha \nabla_i \frac{\delta H}{\delta s_\alpha} + \\ &\quad + \frac{\delta H}{\delta a_{\alpha\beta}} \nabla_i a_{\alpha\beta} - \rho \nabla_i \frac{\delta H}{\delta \rho} - p_j \nabla_j \frac{\delta H}{\delta p_j}, \\ \dot{s}_\alpha &= -\nabla_i \left(s_\alpha \frac{\delta H}{\delta \pi_i} \right) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\delta H}{\delta s_\beta} s_\gamma + \frac{\delta H}{\delta a_{\rho\beta}} a_{\rho\gamma} \right), \end{aligned} \quad (15.3)$$

а уравнения для параметров, описывающих нарушенную симметрию,

$$\begin{aligned}\dot{a}_{\alpha\beta} &= -\frac{\delta H}{\delta \pi_i} \nabla_i a_{\alpha\beta} + a_{\alpha\rho} \varepsilon_{\rho\beta\gamma} \frac{\delta H}{\delta s_\gamma}, \\ \dot{p}_i &= -\nabla_i \left(p_j \frac{\delta H}{\delta \pi_j} + \frac{\delta H}{\delta \rho} \right).\end{aligned}\quad (15.4)$$

В длинноволновом пределе

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(\sigma(x), \rho(x), \pi_i(x), p_i(x), s_\alpha(x), a_{\alpha\beta}(x), \omega_{\alpha k}(x)),$$

и плотности потоков интегралов движения согласно (1.15)—(1.18) равны

$$\begin{aligned}j_k &= \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}, \quad j_{\alpha k} = s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}}, \\ q_k &= \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} \right) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \right) + \\ &\quad + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \right),\end{aligned}\quad (15.5)$$

$$t_{ik} = p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}},$$

$$p \equiv -\varepsilon + \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} + \pi_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_l} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\alpha}.$$

Если плотность энергии инвариантна относительно спиновых вращений, то

$$\varepsilon(..., s, \omega_k, a) = \varepsilon(..., \underline{s}, \underline{\omega}_k). \quad (15.6)$$

Локальные уравнения движения для сверхтекучей В-фазы ${}^3\text{He}$, соответствующие плотности энергии (15.6), имеют вид

$$\begin{aligned}\dot{\sigma} &= -\nabla_k \left(\sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} \right), \quad \dot{\rho} = -\nabla_k \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \right), \\ \dot{\pi}_i &= -\nabla_k \left(p \delta_{ik} + \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} + \omega_{\alpha i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \right), \\ \dot{s}_\alpha &= -\nabla_k \left(s_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\alpha k}} \right) + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(s_\beta \frac{\partial \varepsilon}{\partial s_\gamma} + \omega_{\beta k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega_{\gamma k}} \right),\end{aligned}\quad (15.7)$$

а уравнения для параметров, описывающих нарушенную симметрию,

$$\dot{a}_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\gamma} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial s_{\gamma}} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} \omega_{\gamma i} \right) a_{\rho\beta},$$

$$\dot{p}_i = -\nabla_i \left(p_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_j} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right). \quad (15.8)$$

Уравнения (15.7), (15.8) совпадают с полученными ранее в работе [43].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, нами построен систематический метод получения СП динамических переменных, основанный на задании кинематической части лагранжиана и интерпретации внеинтегральных членов в вариации действия как генераторов канонических преобразований. При построении кинематической части лагранжиана параметры порядка определяются в терминах величин, сопряженных плотностям аддитивных интегралов движения. В рассмотренном нами подходе плотность энтропии является динамической переменной, что требует введения дополнительной сопряженной переменной (переменная ψ), которая, однако, не входит в уравнения движения вследствие предположения об ее цикличности. Важную роль при написании кинематической части лагранжиана играет определение операторов пространственного сдвига, связанных с различными физическими полями, входящими в лагранжиан, такими как энтропийное поле, поля фаз параметров порядка и т.д. На основе развитого подхода удалось рассмотреть с единой точки зрения самые разнообразные физические системы, начиная с классических сплошных сред и заканчивая макроскопическими квантовыми объектами (различные магнитоупорядоченные системы, сверхтекучие жидкости, квантовые кристаллы). Общность рассмотрения достигается благодаря как универсальности данного формализма, так и использованию приема выделения подалгебр СП динамических переменных из более общей алгебры с дальнейшим предположением о цикличности переменных, не входящих в подалгебру.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дирак П. — Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979.
2. Дирак П. — Лекции по квантовой механике. М.: Мир, 1968.
3. Швингер Ю. — Квантовая кинематика и динамика. М.: Наука, 1992;
Schwinger J. — Phys. Rev., 1951, vol.82, p.914; Phys. Rev., 1953, vol.91, p.713.
4. Гитман Д.М., Тютин И.В. — Каноническое квантование полей со связями. М.: Наука, 1986.

5. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. — Поля и фундаментальные взаимодействия. Киев: Наукова думка, 1986.
6. Захаров В.Е., Манков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. — Теория солитонов. Метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.
7. Тахтаджян Л.А., Фаддеев Л.Д. — Гамильтонов подход в теории солитонов. М.: Наука, 1986.
8. Переломов А.М. — Интегрируемые системы классической механики и алгебры Ли. М.: Наука, 1990.
9. Дубровин Б.А., Новиков С.П. — УМН, 1989, т.44, с.29.
10. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. — Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974.
11. Уизем Дж. — Линейные и нелинейные волны. М.: Мир, 1977.
12. Боголюбов Н.Н. — Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946.
13. Лэмб Х. — Гидродинамика. М.: Гостехиздат, 1947.
14. Дубровин Б.А., Новиков С.П. — ДАН СССР, 1983, т.270, №4.
15. Голдстейн Г. — Классическая механика. М.: Наука, 1975.
16. Dzyaloshinsky I.E., Volovick G.E. — Ann. Phys., 1980, vol.125, p.67.
17. Вирченко Ю.П., Пелетминский С.В. — В сб.: Проблемы физической кинетики и физики твердого тела. Киев: Наукова думка, 1990, с.63.
18. Воловик Г.Е. — Письма в ЖЭТФ, 1980, т.31, с.297.
19. Воловик Г.Е., Кац Е.И. — ЖЭТФ, 1981, т.81, с.240.
20. Кац Е.И., Лебедев В.В. — Динамика жидких кристаллов. М.: Наука, 1988.
21. Leggett A.J. — Rev. Mod. Phys., 1975, vol.47, p.331.
22. Покровский В.Л., Халатников И.М. — Письма в ЖЭТФ, 1976, т.23, с.653.
23. Лебедев В.В., Халатников И.М. — ЖЭТФ, 1978, т.75, с.2312.
24. Воловик Г.Е., Доценко В.С. (мл.) — ЖЭТФ, 1980, т.78, с.132.
25. Волков Д.В., Желтухин А.А. — Изв. АН СССР. Сер. физ., 1980, т.44, с.1487.
26. Голо В.Л. — ЖЭТФ, 1981, т.81, с.942.
27. Ковалевский М.Ю., Пелетминский С.В., Шишкин А.Л. — УФЖ, 1991, т.36, с.245.
28. Исаев А.А., Ковалевский М.Ю. — ФНТ, 1994, т.20, с.1125.
29. Isayev A.A., Kovalevsky M.Yu., Peletminsky S.V. — Preprint of International Centre for Theoretical Physics, 1994, IC/94/329, p.35.
30. Pauli W. — Nuovo Cim., 1953, vol.10, p.648.
31. Бакай А.С., Степановский Ю.П. — Адиабатические инварианты. Киев: Наукова думка, 1981.
32. Isayev A.A., Kovalevsky M.Yu., Peletminsky S.V. — Mod. Phys. Lett. B, 1994, vol.8, p.677.
33. Де Жен П.Ж. — Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977.
34. Finkelmann H., Kock H.J., Rehage G. — Makromol. Chem. Rap Commun., 1981, vol.2, p.317.
35. Deeg F.W., Diercksen K., Schwalb G. et al. — Phys. Rev. B, 1991, vol.44, p.2830.
36. Brand H.R., Pleiner H. — Physica A, 1994, vol.208, p.359.
37. Kupfer J., Finkelmann H. — Makromol. Chem. Rap. Commun., 1991, vol.12, p.717.

38. Legge C.H., Davis F.J., Mitchell G.R. — J. Phys. II (France), 1991, vol.1, p.1253.
39. Волков Д.В., Желтухин А.А., Блиох Ю.П. — ФТТ, 1971, т.13, с.1668.
40. Halperin B.I., Saslow W.M. — Phys. Rev. B, 1977, vol.16, p.2154.
41. Saslow W.M. — Phys. Rev. B, 1980, vol.22, p.1174.
42. Андреев А.Ф., Марченко В.И. — УФН, 1980, т.130, с.39.
43. Maki K. — Phys. Rev. B, 1975, vol.11, p.4264.
44. Ковалевский М.Ю., Пелетминский С.В., Рожков А.А. — ТМФ, 1988, т.75, с.85.
45. Исаев А.А., Ковалевский М.Ю., Пелетминский С.В. — ТМФ, 1993, т.95, с.58.
46. Halperin B.I., Hohenberg P.C. — Phys. Rev., 1969, vol.188, p.898.
47. Исаев А.А., Ковалевский М.Ю., Пелетминский С.В. — ФММ, 1994, т.77, с.20.
48. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
49. Островский В.С. — ЖЭТФ, 1986, т.91, с.1690.
50. Локтев В.М., Островский В.С. — ФНТ, 1994, т.20, с.983.
51. Онуфриева Ф.П. — ЖЭТФ, 1984, т.86, с.1691.
52. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. — Спиновые волны. М.: Наука, 1967.
53. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. — ЖЭТФ, 1969, т.56, с. 2057.
54. Saslow W.M. — Phys. Rev. B, 1977, vol.15, p.173.
55. Лавриненко Н.М., Пелетминский С.В. — ТМФ, 1986, т.66, с.314.
56. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Теория упругости. М.: Наука, 1987.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОЛИМОРФИЗМ ДИСПЕРСНЫХ АМОРФНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ: НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА КОЛЕБЛЮЩИХСЯ АТОМАХ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Е.Ф.Шека, И.В.Маркичев

Российский университет дружбы народов, Москва

И.Натканец, В.Д.Хаврюченко***

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В обзоре систематизируются результаты подробного исследования колебательных спектров ряда промышленных аморфных высокодисперсных кремнеземов (аэросил, силикагель, аэрогель) с помощью неупругого рассеяния нейтронов. Обсуждаются обнаруженное явление технологического полиморфизма и результаты квантово-химического моделирования структур и колебательных спектров соответствующих полиморфных модификаций.

The results concerning the vibrational spectra for a set of commercial amorphous highly disperse silicas (aerosil, silica gel and aerogel), studied in details by inelastic neutron scattering, are reviewed. The observed phenomenon of a technological polymorphism as well as quantum chemical modelling of the structure and vibrational spectra of the related polymorphic modifications are discussed.

1. ВВЕДЕНИЕ

Класс химических веществ, известных под общим названием «кремнеземы», объединяющий как природные вещества — от кварца и кристобалита до полудрагоценных камней, так и искусственные — от кварцевого

*Постоянный адрес: Институт ядерной физики им. Х.Неводничаньского, 31-342 Краков, Польша

**Постоянный адрес: Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины, 252028, Киев, Украина

стекла до аэрогеля, в своем основании имеет простейшее соединение: оксид кремния (SiO_2) [1]. Семейство аморфных высокодисперсных кремнезёмов, включающее аэросилы, аэросилогели, силикагели, пористые стекла, силихромы и аэрогели, входит в него как составная часть [2,3].

Важность высокодисперсных кремнезёмов для химии и химической технологии трудно переоценить. Они в больших количествах используются в химической промышленности как адсорбенты, наполнители и разрыхлители [4]. Кремнезёмы известны одновременно как лекарства и как усилители биологической активности веществ и лекарств, а также как хемосорбенты, консерванты для живых вакцин и т.д. Их многочисленные применения базируются на уникальной поверхностной активности, природа которой интенсивно изучается в течение длительного времени [5,6].

Исследованиям дисперсных кремнезёмов посвящено огромное количество работ. Довольно длительное время они проводились, главным образом, эмпирическими химическими методами, и лишь в конце 60-х годов началось применение спектрометрических методов — колебательной ИК- и КР-спектроскопии [7—13] и спектроскопии ЯМР (см. обзор в [14]). Однако как из-за сложностей экспериментального характера, так и из-за трудностей в интерпретации полученных данных результаты являются во многом качественными, что затрудняет использование оптической колебательной спектроскопии для структурно-композиционного изучения этих веществ.

В отличие от оптической, нейтронная колебательная спектроскопия достигла в последние годы [15,16] значительного прогресса в этом направлении благодаря возможности уверенного выделения частей спектра, соответствующих определенным структурным фрагментам системы, в том числе и поверхности. Последнее достижение следует отметить особо, поскольку хорошо известно, что неупругое рассеяние тепловых нейтронов (НРН) в общем случае является объемным методом исследования из-за большой средней длины свободного пробега нейтронов в среде (порядка 10^{-2} м) [17]. Однако если удельная поверхность увеличивается, как это имеет место в случае высокодисперсных веществ, и если поверхность образца покрыта водородосодержащими веществами (ядра протия обладают исключительно высоким сечением рассеяния нейтронов и амплитуда их смещений при колебаниях велика), то вклад рассеяния на поверхностных колебаниях существенно увеличивается. При этом ситуация благоприятна не только для водородосодержащих адсорбентов, но и для колебаний подложки в результате «эффекта всадника» [18,19]. Дисперсные кремнезёмы удовлетворяют обоим приведенным условиям, поэтому применение к ним спектроскопии НРН оказалось чрезвычайно успешным. В результате проведения серии целенаправленно спланированных экспериментов [20—29] удалось определить спектры колебаний объема, или остова, ряда представителей этих веществ и колебаний поверхностных зон. Результаты, полученные для серии

различных промышленных кремнеземов, оказались принципиально значимыми. Было показано, что исследованным кремнеземам соответствовали настолько различные колебательные спектры остовов и поверхностных зон, что возникла необходимость отнести эти вещества к принципиально различным структурным образованиям [30—32]. Так было спектрально обнаружено явление, получившее название технологического полиморфизма [30]. Оно легло в основу нового, алгоритмического подхода к вычислительному моделированию изученных веществ [30—32]. Это моделирование, проведенное на уровне наиболее современных квантово-химических методов [33—35], позволило построить модели структур, объясняющие поведение колебательных спектров различных типов кремнеземов, и установить однозначную связь между этим явлением и различиями химических технологий, используемых для получения продуктов. Верификация подхода была осуществлена успешным сравнением расчетных и экспериментальных колебательных спектров, измеряемых с помощью НРН.

Целью настоящего обзора является систематизация полученных результатов и способов их обработки, направленная на выявление и выработку подхода к изучению специфического явления технологического полиморфизма. Будучи впервые тщательно исследованным для дисперсных кремнеземов, это явление оказалось одним из отличительных признаков наноразмерных материалов практически любого класса [36], в связи с чем его понимание является одним из определяющих факторов создания основных материалов ближайшего будущего.

2. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСПЕРСНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ

2.1. Структурные свойства и ИК-поглощение. Известно, что дисперсные аморфные кремнеземы получают при конденсации и полимеризации, сопровождающей гидролиз тетрагалогенов кремния, их ортоорганических эфиров и солей кремниевой кислоты [1]. Полимеризация приводит к образованию силоксановых (SiOSi) цепочек и непланарных циклов с различным числом членов. Упаковываясь в пространстве, эти цепочки и циклы образуют объемную структуру (ядро, или остов) кремнезема. Эти же цепочки и циклы формируют его поверхность. Валентные связи поверхностных атомов кремния насыщены при этом лишь с внутренней стороны поверхности. Имеется «избыток валентности» на внешней стороне, который насыщается в присутствии молекул воды путем присоединения гидроксильных групп различной конфигурации. Возникающие активные центры поверхности охотно адсорбируют воду, вследствие чего вокруг твердого силоксанового ядра возникает характерная оболочка, состоящая из гидроксильных групп и адсор-

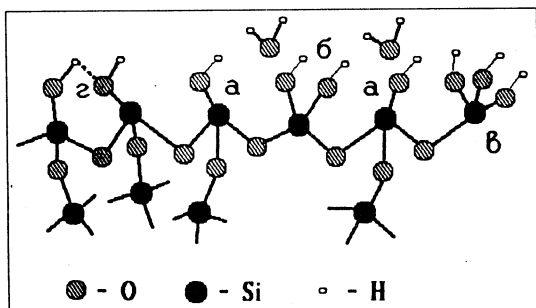


Рис.1. Схематическое представление о структуре аморфного кремнезема: а) силанольные группы, б) силандиольная группа, в) силантриольная группа, г) группы, связанные водородной связью

бироваанной воды. Этот взгляд на структуру аморфных дисперсных кремнезёмов изложен в хорошо известной монографии Айлера [1]. За годы, прошедшие со дня ее появления, несмотря на решение многих частных проблем (см. последние монографии [4,5]), этот взгляд не претерпел существенных изменений. Так, на рис.1 показана структурная схема дисперсного кремнезема, принимавшаяся по умолчанию при-

годной для продукта любого происхождения еще три года назад. На этой схеме силоксановая цепочка представляет поверхностный слой атомов основы. Фрагменты ее разветвления вглубь имитируют развитие объемной структуры. Ненасыщенные связи поверхностных атомов кремния закрыты гидроксильными группами, при этом как число групп, приходящихся на один атом кремния, так и их распределение по поверхности, в общем, четко не определено. Наружный слой приведенного структурного фрагмента занимают молекулы адсорбированной воды, положение которых относительно поверхностных групп также показано в значительной мере произвольно. По сути, в приведенной модели наглядно представлено то понимание атомной структуры объема и поверхности дисперсного кремнезема, которое сложилось на основе изучения их ИК-спектров поглощения.

Попытки исследования колебательных спектров дисперсных кремнезёмов методами оптической спектроскопии (ИК-поглощение и отражение, нарушенное полное внутреннее отражение, комбинационное рассеяние) предпринимались неоднократно [7—13]. Однако из-за очень сильного поглощения силоксановой матрицы [37] исследования были сосредоточены главным образом в области $3000 + 4000 \text{ см}^{-1}$, в которой находятся частоты валентных колебаний гидроксильных групп и воды. Полученные результаты, даже в сочетании с дейтеро-противным обменом, дают противоречивую картину (см. [11,13]) и остаются наполовину качественными, что видно из обобщенной картины, представленной в табл.1. Как следует из таблицы, на основании данных в области $3000 + 4000 \text{ см}^{-1}$ установить различие между, например, аэросилом, силикагелем и аэрогелем практически невозможно. Что же касается наиболее структурно-чувствительных областей

Таблица 1. Частоты полос поглощения колебаний свободных гидроксильных групп кремнезёмов, обработанных при высоких температурах [13]

Образец	Частоты, см ⁻¹			Интерпретация
	t °, C	ОН	OD	
Пористое стекло	550	4540		Составное колебание валентных колебаний свободных гидроксильных групп в SiOH и валентных колебаний SiO
	750	4550		
Аэрогель	700	4520	3363	Составное колебание валентных и деформационных колебаний свободных гидроксильных групп в SiOH
Пористое стекло	750	3850	2840	Составное колебание валентных и внеплоскостных деформационных колебаний свободных гидроксильных групп в SiOH и SiOD
	550	3749	2761	Составное колебание деформационных колебаний свободных гидроксильных групп в SiOH и SiOD и валентных колебаний в SiO ₄
Силикагель	600	3740	2760	Валентные колебания свободных гидроксильных групп в SiOH и SiOD
	400	3749	2761	
	940	3748		
	500	3740		
Аэросил	940	3750		
	500	3748		
Аэрогель	700	3750	2740	
Аэросил	450	3743		
	400	3737	2755	
	400	3747	2760	
Силикагель	400	3500		Валентные колебания гидроксильных групп в Si(OH) ₂
Пористое стекло	400	2000		Комбинационные и обертоновые колебания остова кремнезёма
		1870		
Аэрогель	600	1635		
Силикагель	400	950		Деформационные колебания в SiOH или валентные колебания группы OH относительно Si
Аэрогель	400	870		Деформационные колебания в SiOH
	700	770	603	
				Внеплоскостные деформационные колебания в SiOH

$0 \div 400 \text{ см}^{-1}$ и $500 \div 1000 \text{ см}^{-1}$, то первая полностью закрыта в ИК-спектрах поглощением силоксанового объема, а вторая по той же причине исследована плохо [37—39]. Имеющаяся информация об этой области извлекается главным образом из анализа составных частот.

Основные заключения, сделанные на основании исследования ИК-поглощения, сводятся к следующему.

1. Сходство поведения различных дисперсных кремнеземов в ряде базовых реакций [1—5] позволяет предположить подобие структур их поверхностей, вследствие чего исследования в основном проводятся на различных образцах аэросила как наиболее химически чистого кремнезема.

2. Вследствие сосредоточения исследований главным образом в области $3000 \div 4000 \text{ см}^{-1}$ основными объектами изучения являются гидроксильный покров и адсорбированная вода.

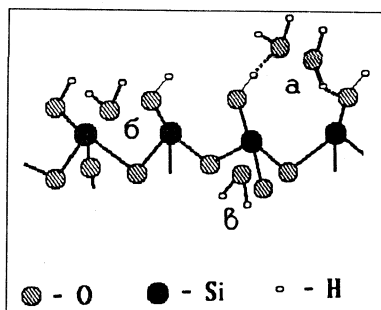
3. Поверхность аэросила равномерно покрыта силанольными группами с плотностью $\sim 4,6 \text{ гр./нм}^2$, что соответствует среднему расстоянию между ними $0,7 \text{ нм}$ [5]. Существование силандиольных групп не оспаривается, однако их количество по данным различных авторов колеблется от 4 до 40% [5,14]. Силантриольные группы на поверхности аэросила в обычных условиях не обнаруживаются [40].

4. Система адсорбат/подложка в случае вода/кремнезем состоит из двух партнеров: силанольной группы и молекулы воды. Расхождения между авторами сводится к вопросу о типе взаимодействия между партнерами. Часть авторов склоняется к координационной природе центров адсорбции воды [6], другие полагают, что молекула воды связывается с гидроксильным центром посредством водородной связи. Из работ недавнего времени, посвященных этому вопросу, следует выделить исследования [14,41,42], в которых делается попытка объяснить механизм адсорбции воды на основании исследования динамики дейтеро-противевого обмена в гидроксильных группах с помощью контроля интенсивности полос поглощения групп ОН и OD (соответственно 3749 и 2761 см^{-1}). На основании этих исследований сделано два вывода: 1) адсорбция воды идет на гидроксильных группах и 2) на поверхности аэросила есть участки с существенно различной скоростью адсорбции воды, т.е. имеются гидроксильные группы существенно различной структуры. В работе [43] аналогичные выводы сделаны на основании расчетов методом молекулярной динамики. Различные возможные положения адсорбированной на кремнеземе воды изображены на рис.2.

В целом исследования ИК-поглощения так и не дали ответа на следующие основные вопросы химии дисперсных кремнеземов:

— насколько одинаково строение ядра различных промышленных форм аморфных дисперсных кремнеземов;

Рис.2. Схематическое представление о положении адсорбированных молекул воды на поверхности аморфного кремнезема [6]: а) вода, связанная водородной связью, б) вода, координированная в *цис*-положении, в) вода, координированная в *транс*-положении



— как формируется их поверхность и каково распределение на ней гидроксильных групп;

— каковы условия существования на поверхности силанольных, силандиольных и силантриольных групп;

— каковы механизмы адсорбции различных веществ и, в первую очередь, воды на поверхности этих продуктов.

Это обстоятельство заставило искать новые пути дискриминирования веществ. Эффективным спектральным методом явилось неупругое рассеяние нейтронов. Этот метод позволил перенести спектральные исследования колебательного спектра в область $0 + 1500 \text{ см}^{-1}$, где лежат наиболее структурно-чувствительные деформационные, торсионные и крутильные колебания гидроксильных групп, воды и силоксанового остова, и поставить вопрос о получении колебательных спектров отдельных структурных компонентов каждого кремнеземного образца.

2.2. Применение спектроскопии неупругого рассеяния нейтронов к исследованию колебательных спектров. Спектроскопия НРН является сравнительно новым методом исследования поверхности. Первоначально исследования с помощью упругого (дифракция) и неупругого (колебательная спектроскопия) рассеяния нейтронов [17,44] были ориентированы на изучение объемных характеристик, поскольку из-за высокой проникающей способности нейтрона вклад поверхностных атомов в спектр рассеяния на образце был неощутимо мал. Однако, как было сказано во введении, ситуация становится более благоприятной для высокодисперсных образцов, что и было подтверждено на примере дисперсных кремнеземов. При исследовании НРН от этих образцов в полной мере проявились основные преимущества нейтронной спектроскопии: чувствительность к противевым ядрам и к изотопному замещению протий — дейтерий, отсутствие правил отбора при передаче энергии, вовлеченность в процесс рассеяния широкого спектра колебательных состояний и др.

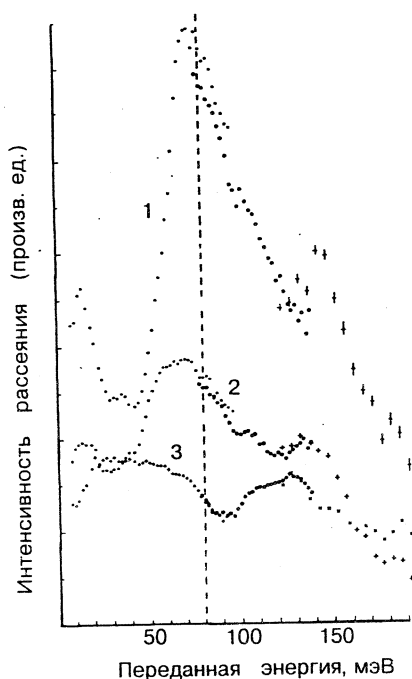


Рис.3. Спектры НРН от силикагеля Gasil1200, 15 К [45] при различной влажности: 1) 13%; 2) 4%; 3) высушенный при 150°C образец

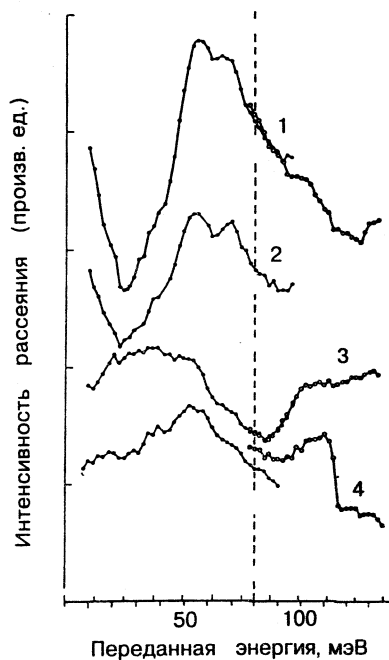


Рис.4. Спектры НРН от силикагеля Spherisorb S20W, 15 К [45] при различной влажности: 1) 3%; 2) 2%; 3) 1%; 4) высушенный при 110° образец

Одна из первых результативных работ по изучению колебаний воды, адсорбированной на поверхности кремнезема, была выполнена в 1981 г. [45]. Предшествующие исследования 1964—1975 гг. [46—48], посвященные той же проблеме, были проведены при комнатной температуре, что ограничивало возможности изучения низкочастотных колебательных мод. В работе [45] были изучены два образца кремнеземов (силикагели) при температуре 15 К: Gasil1200 (расчетный диаметр пор 21 Å, удельная поверхность 850 м²/г) и Spherisorb S20W (соответственно 89 Å и 232 м²/г). Основным результатом работы явилось установление отличия спектра колебаний воды в порах силикагелей от спектра колебаний обычного льда (см. рис.3 и 4) и возрастание сдвига максимума спектра, расположенного на 640 см⁻¹, в низкочастотную область при переходе от силикагеля с малым диаметром пор к силикагелю с меньшим размером пор. Так, из рис.3 видно, что при

максимальной влажности образца главный пик спектра практически совпадает с основной полосой в спектре льда H_2O , положение которой показано вертикальной штриховой линией. При высушивании образца положение этого пика в спектре силикагеля сдвигается в низкочастотную область. Аналогичный эффект наблюдается при переходе к образцу с меньшим размером пор. Для обсуждения причин такого сдвига была предложена модель адсорбции воды на соседних поверхностных гидроксильных группах, однако эта модель имела очень качественный характер.

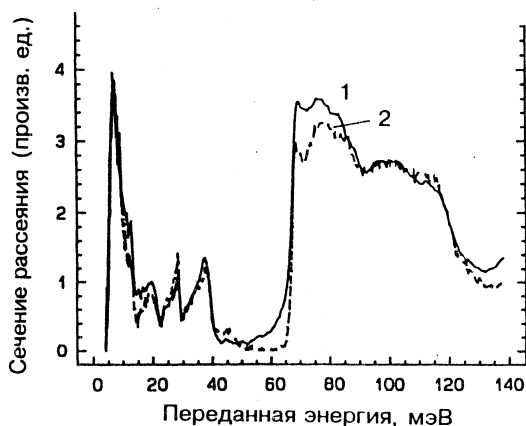


Рис.5. Спектры НРН от льда: 1) лед в пористом стекле Vycor glass [56]; 2) гексагональный лед [57]

Было также установлено, что свойства воды в области контакта с поверхностью существенно отличаются от ее свойств в объеме. Так, вблизи поверхности кремнезема изменяется плотность воды [49], коэффициент диффузии [50] и ее вязкость [51,52]. Изучение дифракции [52—55] показало, что вода в порах имеет структуру льда кубической модификации Ic; обычный лед при таких же условиях представляет собой гексагональный кристалл Ih. Этот эффект объясняется изменением структуры воды вблизи поверхности кремнезема, однако объяснения остаются качественными, особенно с учетом высказанного в [56] замечания о различиях в структуре поверхности самих кремнеземов. В той же работе на основании модельных расчетов и эксперимента при температуре 15 К на образце стекла марки Vycor glass (боросодержащие стекла) со средним диаметром пор 30 Å и удельной поверхностью 180 м²/г показано, что в системе кремнезем/вода не существует четкой поверхности раздела в виде слоев разной плотности. Высказано также предположение о том, что на самом деле структура льда в слоях, испытывающих сильное влияние поверхности, не вполне кристаллическая, а подобна структуре жидкой воды, где большое число водородных связей разорвано. На основании сравнения колебательных спектров адсорбированной на стеклах воды со спектрами обычного льда [57], которые оказались достаточно близкими (см. рис.5), был сделан вывод о том, что вода в порах Vycor glass присутствует в двух видах: в виде объемной воды и в виде воды, адсорбированной на стенках пор. Это заключение



Рис.6. Спектры НРН воды, адсорбированной на стенках пор в пористом стекле Vycor glass [56]: 1) высушенный образец остаточной 10%-ной влажности, 2) разностный спектр «образец 100%-ной влажности — гексагональный лед»

подтверждается большим сходством разностного спектра «воздушно-сухой образец — лед» и спектра «высушенного образца» (см. рис.6). На основании этого сходства авторы [56] выдвинули гипотезу о наличии квазисвободной воды в порах. Однако в работе приведены лишь качественные соображения относительно величины вклада спектра льда в спектр образца стекла 100%-ной влажности.

Из последних работ в области колебательной спектроскопии поверхности с применением НРН можно отметить исследования кремнеземов, поверхность которых была модифицирована различными органическими соединениями [58], поверхностных колебаний легкого водорода, адсорбированного на никеле [59] и молибдене [60], колебаний воды и аммония, адсорбированных на оксидах марганца и циркония [61], колебательных спектров кварцевого стекла [62], природных кремнеземных минералов типа цеолита [63] и опала [64]. Большой цикл работ посвящен изучению колебательных спектров различных модификаций льда [65—76]. Отдельно следует выделить цикл работ [77—81], в которых изучались фрактальные возбуждения в аэрогеле.

Из приведенного обзора видно, что НРН позволяет, в принципе, ставить вопрос об изучении поверхности дисперсных кремнеземов. Однако недостаток систематических экспериментальных спектроскопических исследований, отсутствие постановки задачи о выделении поверхностной составляющей колебаний из общего спектра не привели на этом этапе к практически важным результатам. Задача о дискриминировании различных кремнеземов в значительной степени решена в серии работ [20—29], предпринятых со специальной целью систематического изучения колебательных спектров определенным образом приготовленных образцов различных дисперсных кремнеземов. В них подробно рассмотрена аддитивная композиционная модель дисперсного кремнезема, уточнены понятия остова (ядра), гидро-

кисильной и водной оболочек. Предложен и обоснован разностно-корреляционный метод определения спектров компонентов сложной системы из экспериментально измеренных спектров на основе постулата о некоррелированности спектров независимых систем. В разделах 3—5 изложены основные этапы этого исследования, приведшего к установлению нового типа формирования полиморфных модификаций — технологического полиморфизма. В следующих разделах 6 и 7 приведены результаты вычислительного моделирования, направленного на понимание этого явления на атомном уровне.

3. МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ И ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ НРН

3.1. Первичная обработка спектров. Колебательная спектроскопия НРН основана на том, что тепловые нейтроны, попавшие в исследуемый образец, могут передать часть своей энергии на возбуждение некоторой колебательной моды в веществе или поглотить это возбуждение, приобретая соответствующую энергию, тем самым рассеиваясь неупруго. Изменение энергии нейтрона может быть зафиксировано различными способами [17,44]. Рассеяние следующего нейтрона происходит независимо от предыдущего с возбуждением/поглощением той же или иной колебательной моды, в результате чего можно получить колебательный спектр изучаемого образца, измеряя интенсивность рассеяния нейтронов при сканировании величины переданной/полученной нейтроном энергии.

В экспериментальном методе определения потери энергии нейтрона по времени пролета, являющегося основным методом измерения НРН на высокопоточном реакторе ИБР-2 Объединенного института ядерных исследований в Дубне [82], спектр НРН представляет собой (см., например, [83]) функцию

$$N(t_0) = \Delta t_0 \iiint dE_0 dE dt F(E_0, E, t_0, t) \sigma(E_0, E, \phi, T), \quad (1)$$

где

$$F(E_0, E, t_0, t) = A(E_0, E, t_0, t) \rho(E_0, t) n(E_0) \Phi(E). \quad (2)$$

Здесь $N(t_0)$ — число нейтронов, пришедших на анализатор за временной интервал Δt_0 к моменту времени t_0 , $\sigma(E_0, E, \phi, T)$ описывает закон рассеяния на ядрах (E_0 и E — энергии падающего и рассеянного нейтронов, ϕ — угол рассеяния, T — температура), $F(E_0, E, t_0, t)$ — аппаратная функция прибора, включающая в себя энергетическое распределение падающих и рассеянных нейтронов и условие временной синхронизации. Поперечное сечение рассеяния нейтронов σ в общем случае описывается суммой

$$\sigma(\omega, T) = \sigma^{(1)}(\omega, T) + \sigma^{(mph)}(\omega, T) + \sigma^{(mpl)}(\omega, T), \quad (3)$$

где индексы (1), (mph) и (mpl) соответствуют процессам однофононного, многофононного и многократного рассеяния.

Сечение однофононного некогерентного рассеяния имеет вид

$$\sigma^{(1)}(\omega, \phi, T) = \sum_i \frac{d^2 \sigma_i^{\text{HK}}}{d\omega d\Omega} = \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k}_0} \frac{\hbar |\mathbf{Q}|^2}{2M\omega} \sum_i (b_i^{\text{HK}})^2 \frac{\exp(-2W_i)}{1 - \exp(-\hbar\omega/kT)} G_i^{\text{HK}}(\omega),$$

$$G_i^{\text{HK}}(\omega) = \frac{1}{M_i} \sum_j \int dq |A_j^i(q)|^2 \delta(\omega - \omega_j(q)). \quad (4)$$

Здесь $G_i^{\text{HK}}(\omega)$ — взвешенная на квадратах амплитуд смещений i -го ядра плотность колебательных состояний вещества [83,84], $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}$ — волновые векторы падающего и рассеянного нейтронов, $\mathbf{Q}$ — их разность, b_i^{HK} — амплитуда некогерентного рассеяния на i -м ядре (значения сечений рассеяния на ядрах, входящих в состав кремнезёмов, приведены в табл.2), M_i — масса i -го ядра, W_i — фактор Дебая — Валлера, A_j^i — вектор смещения i -го ядра, отвечающий j -й колебательной моде, $\hbar\omega = E_0 - E$ — переданная энергия. Величина

$$G(\omega) = \sum_i (b_i^{\text{HK}})^2 G_i^{\text{HK}}(\omega) \quad (5)$$

Таблица 2. Полные сечения рассеяния нейтронов [17]

Атом/вещество	Полное сечение рассеяния*, σ^0 , б
H	81,5
D	7,6
O	4,24
Si	2,2
OH	85,74
OD	11,84
H ₂ O	167,24
D ₂ O	19,44
SiO ₂	10,68

* σ^0 определяется суммой величин сечений ядерного когерентного и некогерентного рассеяния на ядре n -го типа.

называется дважды амплитудно-взвешенной плотностью состояний (АВПС). Именно эта величина может быть получена из экспериментального спектра (1) в результате решения обратной задачи при условии, что спектр рассеяния обусловлен однофононными процессами. Однако, как известно, задачи на обратную свертку в общем случае не поддаются решению, поэтому в практике эксперимента по НРН аналогом точной функции $G(\omega)$ является несколько загрубленная функция $\bar{G}(\omega)$, определяемая как [82]:

$$\tilde{G}_T(\omega) = \frac{N_T(t(\omega))}{\Phi(t(\omega), E(\omega)) \cdot K(\omega, T)} \quad (6)$$

Здесь $\Phi(t(\omega), E(\omega))$ — преобразованная аппаратная функция спектрометра, а функция $K(\omega, T)$ имеет вид

$$K(\omega, T) = \frac{k}{k_0} \frac{\hbar |Q|^2}{2\omega} \frac{\exp(-2W_i)}{1 - \exp(-\hbar\omega/kT)} \quad (7)$$

и легко вычисляется, если известна угловая конфигурация эксперимента.

Приводимые ниже спектры $N(t)$ получены на времяпролетном спектрометре обратной геометрии КДСОГ-1М высокопоточного реактора ИБР-2 в ОИЯИ [82]. Все спектры нормированы на одинаковое число рассеивающих ядер (на 100 г вещества) и одинаковое время измерения. Это позволяет проводить количественный сравнительный анализ полученных спектров. Низкая температура являлась достаточным основанием для предположения о преобладающей роли в спектрах $N(t)$ однофононных процессов рассеяния [84], что позволило определять искомые спектры АВПС в соответствии с (6).

3.2. Набор дисперсных кремнеземов. Обсуждаемый цикл исследований был выполнен для трех промышленных продуктов высокодисперсного кремнезема: аэросила марки А380 (удельная поверхность $380 \text{ м}^2/\text{г}$), силикагелей СГ100 и СГ20 (средний диаметр пор 100 и $20 \text{ \AA}$ соответственно) и аэрогеля АГ200 (плотность 200 кг/м^3). В соответствии с основной моделью, согласно которой дисперсные кремнеземы любого происхождения представляют собой трехкомпонентную систему, состоящую из кремнеземного остова, гидроксильной и гидратной оболочек [1], были приготовлены образцы, отличающиеся парциальным вкладом этих компонентов. Каждый из исследованных кремнеземов был представлен однотипным набором образцов.

Воздушно-сухим образцом назван исходный образец, полученный как конечный продукт соответствующей технологической цепочки и хранившийся на открытом воздухе при комнатной температуре и при соответствующей влажности. Спектр *воздушно-сухого* образца в дальнейшем будет обозначаться $Sp^{(1)}$.

Высушенным образцом назван продукт, полученный сушкой *воздушно-сухого* образца на воздухе при определенной для каждого кремнезема температуре. Спектр *высушенного* образца будет обозначаться $Sp^{(2)}$.

Дейтерированным образцом назван образец, полученный в результате процедуры дейтерообмена, состоящей из последовательного высушивания образца в закрытом сосуде с последующим охлаждением в парах тяжелой воды; цикл сушка — охлаждение повторялся несколько раз. Спектр дейтерированного образца будет обозначаться в дальнейшем $Sp^{(3)}$.

Набор спектров $\{Sp^{(j)}\}$ представляет собой основу для получения спектров отдельных компонентов кремнезёмов с использованием разностно-корреляционного метода разложения исходных спектров [85].

3.3. Построение базиса спектра сложной системы. Критерий нулевого коэффициента линейной корреляции. В основе любого метода разложения спектра сложной системы на спектры составляющих ее компонентов лежит аддитивная модель, согласно которой полный спектр системы $Sp^{(j)}$ может быть представлен в виде суммы спектров:

$$Sp^{(j)} = \sum_{i=1}^m k_i^{(j)} Sp_i. \quad (8)$$

Здесь $k_i^{(j)}$ — весовые множители спектров, произведение $k_i^{(j)} Sp_i$ представляет собой *парциальный спектр* i -го компонента в суммарном составном спектре $Sp^{(j)}$, j нумерует независимые спектры исследуемой системы, относящиеся к ее модификациям, отличающимся парциальным вкладом компонентов. Сами спектры Sp_i называются *базисными*.

Хорошо известны два предельных случая, в которых было получено решение о разложении составного спектра $Sp^{(j)}$. В первом, который можно назвать случаем *полного набора базисных спектров*, все базисные спектры Sp_i известны, и порядок системы исходных уравнений (8) $n = 1$. Решение задачи состоит в нахождении коэффициентов $k_i^{(j)}$. Наилучшим решением обычно полагается такое, которое отвечает условию минимума функционала невязки [86]

$$\chi^{(j)} = \sum_r^N [Sp^{(j)}(r) - \sum_{i=1}^m k_i^{(j)} Sp_i(r)]^2, \quad (9)$$

где суммирование ведется по N точкам спектра. Основанный на этом критерии метод хорошо известен как метод наименьших квадратов. В качестве спектров Sp_i могут использоваться как экспериментально измеренные спектры, так и модельные функции типа экспонент, гауссианов, лоренцианов и др. [86]. Определяемыми параметрами разложения являются весовые множители $k_i^{(j)}$ и параметры модельных функций.

Во втором случае, или случае *полного набора весовых множителей*, все коэффициенты $k_i^{(j)}$ известны, порядок системы исходных уравнений $n = m$, и определению подлежат базисные спектры Sp_i . Система (8) сводится к системе линейных алгебраических уравнений, и основной проблемой ее решения является проблема определенности [87,88].

В процессе обработки спектров АВПС дисперсных кремнезёмов задача о разложении суммарного спектра на спектры остова, гидроксильного и водного компонентов возникла естественным образом. С математической точки зрения она относилась к задачам на разложение составного спектра, когда ни базисные спектры, ни отвечающие им весовые факторы не были известны в полной мере. Для решения задачи в этом случае был предложен разностно-корреляционный метод [85], заключающийся в построении физически значимого базиса $\{Sp_i\}$ системы по схеме линейной алгебры:

$$Sp_i = \sum_{j=1}^n \kappa_j^{(i)} Sp^{(j)}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (10)$$

в предположении отсутствия линейной корреляции между базисными спектрами Sp_i . Это требование сформулировано как *критерий нулевого коэффициента корреляции* базисных спектров (критерий НКК), являющийся аналогом условия ортогональности n -мерных векторов. Иными словами, *если составляющие сложную систему компоненты можно считать независимыми, то базисные спектры этих компонентов не коррелированы между собой*. Используя выражение для второго момента стандартных отклонений двух физических величин [86], легко получить математическое выражение этого критерия в виде

$$r = \frac{\sum_r [Sp_i(r) - \overline{Sp_i}] [Sp_k(r) - \overline{Sp_k}]}{\sqrt{\sum_r [Sp_i(r) - \overline{Sp_i}]^2 \sum_r [Sp_k(r) - \overline{Sp_k}]^2}}, \quad (11)$$

где $\overline{Sp_i} = \frac{1}{N} \sum_r Sp_i(r)$ является средней линией спектра, а N определяет

число точек в спектре. Условие равенства r нулю означает равенство нулю числителя в (11), что условно обозначается как

$$C(Sp_i, Sp_k) = 0. \quad (12)$$

Легко показать, что уравнение (12) справедливо не только для пары спектров Sp_i и Sp_k , но и для их линейных комбинаций типа

$$C(Sp_i, \sum_{s \neq i}^m k_s Sp_s) = 0, \quad (13)$$

или

$$C(Sp_i + Sp_l, \sum_{s \neq i, l} k_s Sp_s) = 0. \quad (14)$$

Практическое использование критерия НКК начинается с нахождения простейшей линейной комбинации (10) для выражения левого партнера в (14), в пределе — простой разности $DSp^{(ij')} = Sp^{(i)} - Sp^{(j')}$. Этот разностный спектр должен правильно передавать форму либо спектра Sp_i , либо суммы спектров $Sp_i + Sp_l$, т.е. определять их с точностью до постоянного множителя. Тогда правый партнер в (14) может быть представлен как остаточный спектр $RSp^{(ijj')} = Sp^{(i)} - a^{(ijj')} DSp^{(ij')}$, где $a^{(ijj')}$ — параметр, обеспечивающий отсутствие корреляции между спектрами $RSp^{(ijj')}$ и $DSp^{(ij')}$ в форме (14).

Решая уравнение (14) относительно $a^{(ijj')}$, получаем искомую величину этого параметра

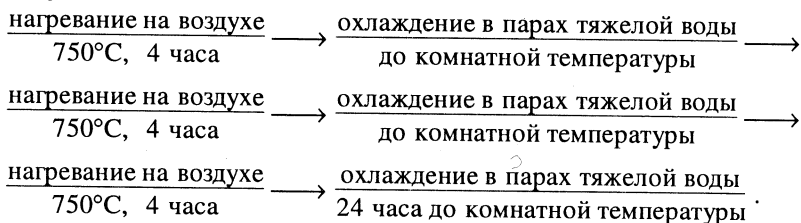
$$a_0^{(ijj')} = \frac{\sum_r^N D\tilde{S}p^{(ij')}(r) \cdot \tilde{S}p^{(i)}(r)}{\sum_r^N (D\tilde{S}p^{(ij')}(r))^2}, \quad (15)$$

где $D\tilde{S}p^{(ij')} = DSp^{(ij')} - \overline{DSp^{(ij')}}$, а $\tilde{S}p^{(i)} = Sp^{(i)} - \overline{Sp^{(i)}}$. Прямой линией сверху отмечены средние линии спектров (см. (11)). Спектр $a_0^{(ijj')} DSp^{(ij')}$ представляет собой или базисный спектр Sp_i , или сумму базисных спектров $Sp_i + Sp_l$. В то же время остаточный спектр $R_0 Sp^{(ijj')} = Sp^{(i)} - a_0^{(ijj')} DSp^{(ij')}$ описывает остаточную комбинацию базисных спектров, входящих в $Sp^{(i)}$, после вычитания из него спектра $a_0^{(ijj')} DSp^{(ij')}$. Повторяя эту процедуру и сканируя по индексам j и j' , можно определить всю совокупность базисных спектров $\{Sp_i\}$. Этот метод был успешно применен для получения базисных спектров аэросила, силикагеля и аэрогеля [25—27].

4. КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ДИСПЕРСНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ

4.1. Аэросил. а) *Образцы и исходные спектры.* Воздушно-сухой образец аэросила А380 представляет собой порошок, состоящий из малых сферических частиц с удельной поверхностью $380 \text{ м}^2/\text{г}$. Средний размер частиц согласно измерениям малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (SAXS) составляет $150 \text{ \AA}$ [19]. После нагревания этого образца на воздухе в течение 6 часов при температуре 750°C был получен *высушенный* А380. В свою

очередь, высушенный образец был подвергнут изотопному замещению атомов протия в гидроксильной и водной оболочках атомами дейтерия согласно следующей схеме:



В результате был получен *дейтерированный* образец А380. Совокупность этих трех образцов составила семейство аэросила А380. Временные спектры НРН образцов этого семейства совместно со спектрами АВПС, полученными в соответствии с (6), приведены на рис.7. В дополнение к спектрам трех указанных выше образцов на рисунке приведены $N(t)$ и АВПС спектры стекла, полученного спеканием аэросила. Эти спектры, в определенном смысле, являются реперными, представляющими спектр объемных колебаний плотноупакованного кремнезема (см. разд.5 п.1).

б) *Базисные спектры компонентов аэросила.* Рассмотрим постановку задачи о разложении исходных спектров. Спектры компонентов аэросила образуют тройку базисных спектров $\{Sp_i\}$, где индексы $i = 1, 2, 3$ отвечают спектрам водной оболочки, ОН-оболочки и кремнеземного остова соответственно. Если физический смысл базисного спектра Sp_3 достаточно ясен, то на двух первых спектрах следует остановиться подробнее. Помимо колебаний воды и гидроксильных групп, в них естественным образом включаются колебания групп атомов, с которыми эти выделенные системы взаимодействуют. Так, в спектр колебаний гидратной оболочки должны быть включены колебания связанного с ней кремний-кислородного центра соответствующего состава. Число таких центров, взаимодействующих с водой, как известно [1,5], намного меньше полного числа гидроксильных групп на поверхности даже в условиях полного насыщения поверхности адсорбированной водой. Остающиеся свободные группы образуют гидроксильную оболочку. Колебания этих групп составляют основу колебательного спектра гидроксильной оболочки. Однако в дополнение к этому заметный вклад в этот колебательный спектр вносят колебания поверхностных атомов кремния и кислорода кремнеземного остова, осязаемые участвующими в соответствующих колебательных движениях атомами водорода гидроксильных групп вследствие хорошо известного «эффекта всадника» [18,19].

Нормированные на 100 г массы экспериментальные спектры АВПС исходного и модифицированных аэросилов образуют набор $\{Sp^{(j)}(\omega)\}$, в котором значения $j = 1, 2, 3$ соответствуют спектрам *воздушно-сухого* А380, *вы-*

сушеного А380 и дейтерированного А380. Если переобозначить парциальные спектры *воздушно-сухого* образца как базисные, то система (8) будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} Sp^{(1)} &= Sp_1^{(1)} + Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}, \\ Sp^{(2)} &= \alpha_1 Sp_1^{(1)} + \alpha_2 Sp_2^{(1)} + \alpha_3 Sp_3^{(1)}, \\ Sp^{(3)} &= \beta_1 Sp_1^{(1)} + \beta_2 Sp_2^{(1)} + \beta_3 Sp_3^{(1)}. \end{aligned} \quad (16)$$

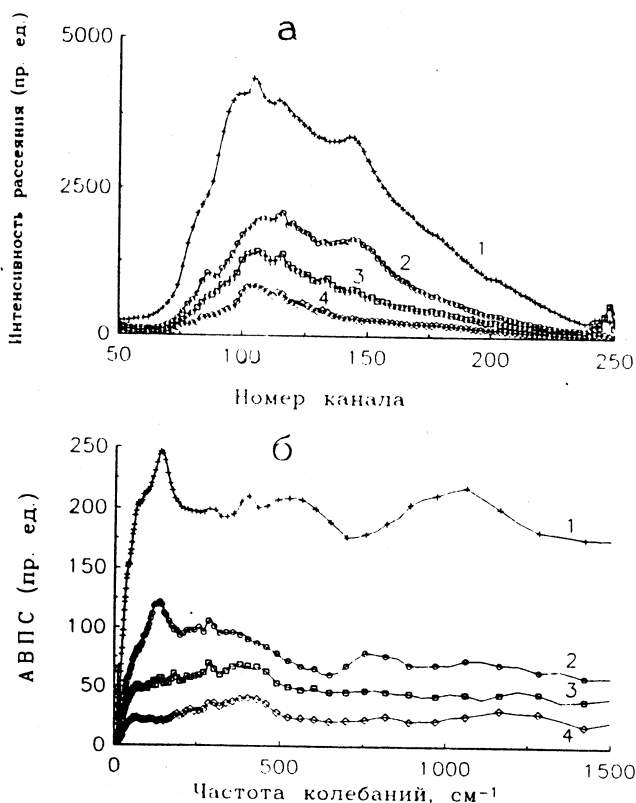


Рис.7. Экспериментальные колебательные спектры семейства аэросила А380, 10К [20]: 1) *воздушно-сухой* образец, 2) *высушенный* образец, 3) *дейтерированный* образец, 4) *аэросильное* стекло; а — *временнóе* спектры НРН, б — спектры АВПС

Прежде чем приступить к построению этого базиса, необходимо определить соотношения между коэффициентами системы (16), знание которых позволяет оптимизировать построение разностных спектров в (14). Рассмотрим эту процедуру на примере аэросила. Параметры α_3 и β_3 определяются тем естественным обстоятельством, что парциальный спектр кремнеземного остова одинаков для всех образцов, т.е.

$$Sp_3^{(1)} = \alpha_3 Sp_3^{(1)} = \beta_3 Sp_3^{(1)}, \text{ или } \alpha_3 = 1 \text{ и } \beta_3 = 1. \quad (17a)$$

Из литературных данных известно [1], что при высушивании аэросила при 750°C с его поверхности полностью удаляется адсорбированная вода и часть гидроксильных групп, таким образом, устанавливаются два следующих соотношения:

$$\alpha_1 = 0 \text{ и } \alpha_2 < 1. \quad (17б)$$

Весовые вклады парциальных спектров воды и гидроксильной оболочки в спектр *дейтерированного* образца $Sp^{(3)}$ должны быть много меньше единицы, поскольку интенсивность рассеяния на нем, вследствие очень сильного подавления рассеяния на водородных ядрах, намного ниже интенсивности рассеяния на *воздушно-сухом* образце, что следует из рис.7. Таким образом,

$$\beta_1 \ll 1 \text{ и } \beta_2 \ll 1. \quad (17в)$$

Известно также [1], что процентное содержание замещенных в результате дейтерообмена атомов в водной и гидроксильной оболочках с достаточной степенью точности одинаково, поэтому

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta. \quad (17г)$$

Итак, на коэффициенты системы уравнений (16) налагаются следующие условия:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= 1, & 0 < \beta_1 < 1, \\ \beta_3 &= 1, & 0 < \beta_2 < 1, \\ \alpha_1 &= 0, & \beta_1 = \beta_2 = \beta. \\ \alpha_2 &< 1, \end{aligned} \quad (18)$$

В соответствии с соотношениями (18) система основных уравнений (16) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} Sp^{(1)} &= Sp_1^{(1)} + Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}, \\ Sp^{(2)} &= \alpha_2 Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}, \\ Sp^{(3)} &= \beta Sp_1^{(1)} + \beta Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Построение базиса. При использовании разностно-корреляционного метода разложения спектра многокомпонентной системы возможен набор

вариантов, определяемых выбором первоначального разностного спектра в (14). Как показано в [25—27], при этом с достаточно хорошей точностью достигается один и тот же конечный результат. Рассмотрим в качестве примера один из таких вариантов. Построим первичный разностный спектр в виде

$$DSp^{(13)} = Sp^{(1)} - Sp^{(3)}. \quad (20)$$

Он является линейной комбинацией базисных спектров Sp_1 и Sp_2 и в соответствии с (19) имеет вид

$$DSp^{(13)} = (1 - \beta) [Sp_1^{(1)} - Sp_2^{(1)}]. \quad (21)$$

Построим остаточный спектр

$$RSp^{(113)} = Sp^{(1)} - a^{(113)} DSp^{(13)} \quad (22)$$

и потребуем, чтобы он не был коррелирован со спектром $DSp^{(13)}$, т.е. чтобы выполнялось условие (14) в виде

$$C(RSp^{(113)}, DSp^{(13)}) = 0. \quad (23)$$

В итоге получаем спектры

$$\begin{aligned} a_0^{(113)} DSp^{(13)} &= Sp_1^{(1)} + Sp_2^{(1)}, \\ R_0 Sp^{(113)} &= Sp_3^{(1)}. \end{aligned} \quad (24)$$

Соответствующий коэффициент $a_0^{(113)}$ определяется уравнением (15).

Рассмотрим теперь разностный спектр

$$DSp^{(21)} = Sp^{(2)} - Sp_3^{(1)}. \quad (25)$$

Согласно (19) он равен $a_2 Sp_2^{(1)}$, т.е. представляет собой парциальный спектр гидроксильной оболочки в спектре *высушенного* А380. Используя полученные разностные спектры $a_0^{(113)} DSp^{(13)}$ и $DSp^{(21)}$, построим остаточный спектр

$$RDSp = a_0^{(113)} DSp^{(13)} - a^{(21)} DSp^{(21)} \quad (26)$$

и потребуем выполнения условий НКК между этим спектром и спектром $DSp^{(21)}$ в виде

$$C(RDSp, DSp^{(21)}) = 0. \quad (27)$$

Определив $a_0^{(21)}$ в соответствии с (15), получаем

$$a_0^{(21)} DSp^{(21)} = Sp_2^{(1)} \quad \text{и} \quad R_0 DSp = Sp_1^{(1)}. \quad (28)$$

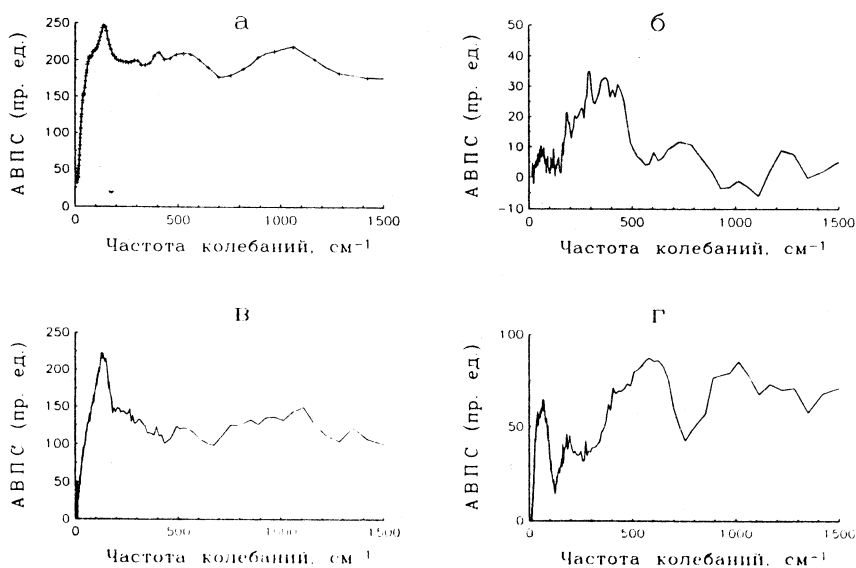


Рис.8. Базисные спектры АВПС компонентов аэросила А380, 10К [25]: а) суммарный спектр *воздушно-сухого* образца; б) *остов*, в) *гидроксильная оболочка*, г) *адсорбированная вода*

Таким образом, базис системы (19) построен. На рис.8 приведен спектр АВПС *воздушно-сухого* образца аэросила совместно со спектрами трех его компонентов [25]. Как было установлено экспериментально [24], исходные спектры *воздушно-сухих* аэросилов с разной величиной удельной поверхности (и размера частиц) с хорошей точностью одинаковы, так что построенные базисные спектры относятся ко всему классу аэросилов.

4.2. Силикагели. а) *Образцы и исходные спектры.* В обсуждаемом цикле работ были исследованы спектры колебаний двух семейств силикагелей, происходящих из исходных промышленных образцов марки КСМ-Г (кусковой мелкопористый гранулированный) производства Менделеевского химзавода и характеризующихся различным размером пор, а именно 20 и 100 Å (СГ20 и СГ100 соответственно). Семейство каждого из силикагелей включало в себя три образца [26]:

$j = 1$, *воздушно-сухой* исходный промышленный образец, хранящийся при комнатной температуре и обычной влажности;

$j = 2$, *высушенный* образец, полученный из исходного сушкой на воздухе в течение 72 часов при температуре 135°C;

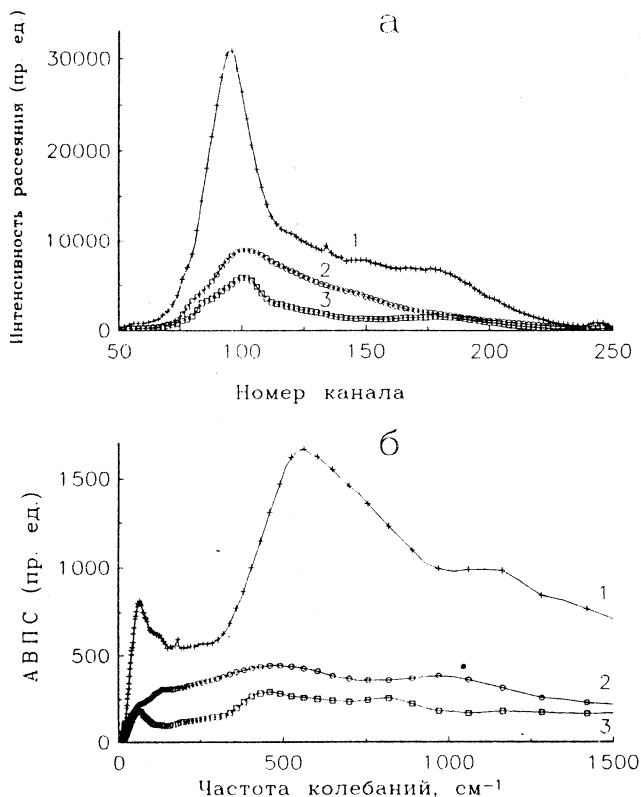


Рис.9. Экспериментальные колебательные спектры семейства силикагеля СГ20, 10К [20]: 1) *воздушно-сухой образец*, 2) *высушенный образец*, 3) *дейтерированный образец*; а — время-пролетные спектры НРН, б — спектры АВПС

$j = 3$, *дейтерированный образец*, полученный из исходного в результате трехкратного циклирования сушки при 135°C с последующим выдерживанием в течение суток в парах тяжелой воды при комнатной температуре.

Дополнительно был исследован спектр *быстрозамороженной воды* (ниже *б/замороженная вода*), необходимый для сравнительного анализа спектра водного компонента.

Спектры НРН образцов семейства силикагеля СГ20 и соответствующие им спектры АВПС, полученные в соответствии с (6), приведены на рис.9. Аналогичные спектры образцов семейства силикагеля СГ100 приведены на рис.10.

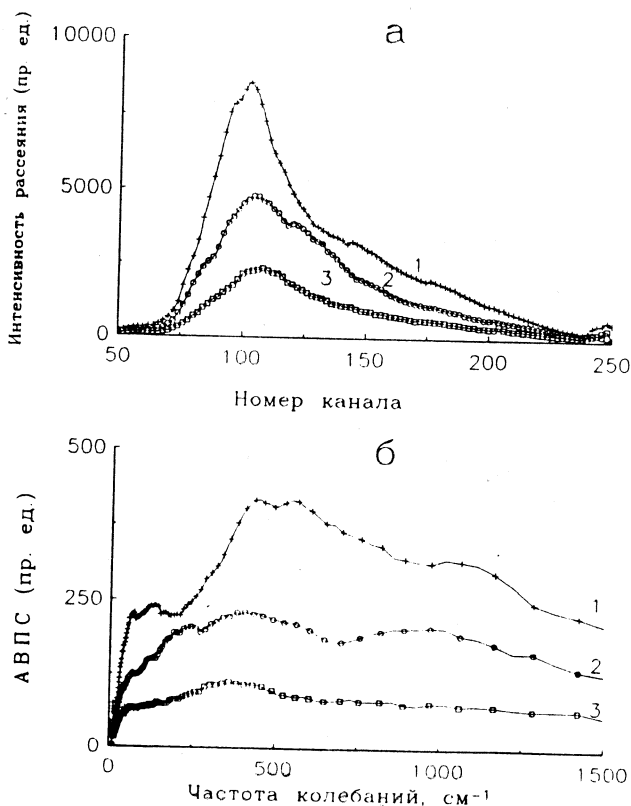


Рис.10. То же, что и на рис.9, но для силикагеля СГ100 [20]

б) *Базисные спектры компонентов силикагелей.* Процедура получения базисных спектров силикагелей аналогична описанной выше для аэросила с той лишь разницей, что вследствие несколько иных соотношений между коэффициентами системы (16) основная система уравнений имеет вид [26]:

$$\begin{aligned}
 Sp^{(1)} &= Sp_1^{(1)} + Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}, \\
 Sp^{(2)} &= \alpha_1 Sp_1^{(1)} + Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}, \\
 Sp^{(3)} &= \beta Sp_1^{(1)} + \beta Sp_2^{(1)} + Sp_3^{(1)}.
 \end{aligned} \tag{29}$$

На рис.11 и 12 представлены спектры *воздушно-сухих* образцов совместно с базисными спектрами их компонентов. При сравнении рисунков обращают на себя внимание две особенности полученных спектров. Во-первых,

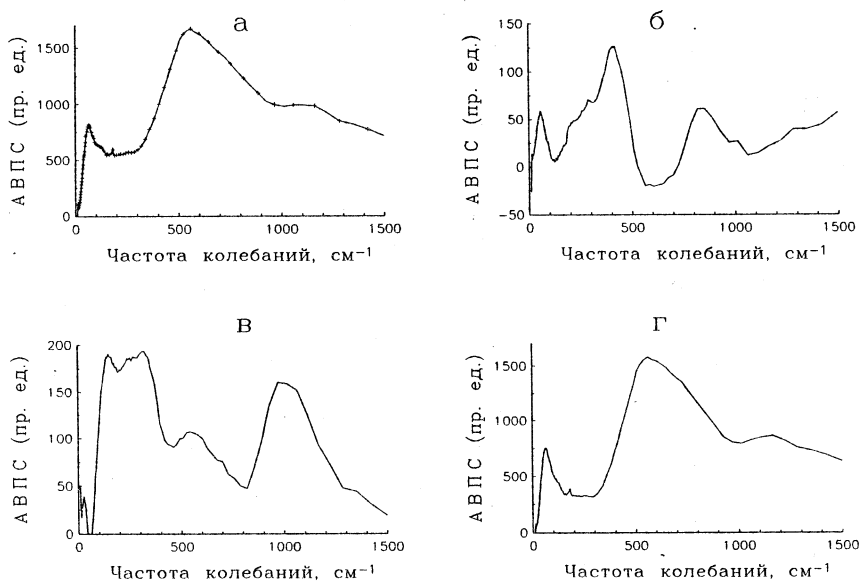


Рис.11. Базисные спектры АВПС компонентов силикагеля СГ20, 10К [26]: а) суммарный спектр *воздушно-сухого* образца; б) осто́в, в) гидроксильная оболочка, г) водный компонент

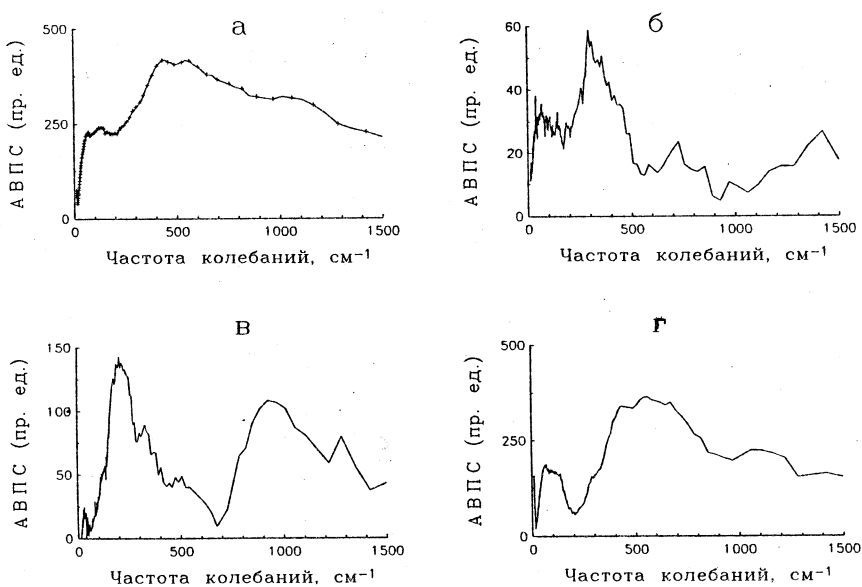


Рис.12. То же, что и на рис.11, но для силикагеля СГ100 [26]

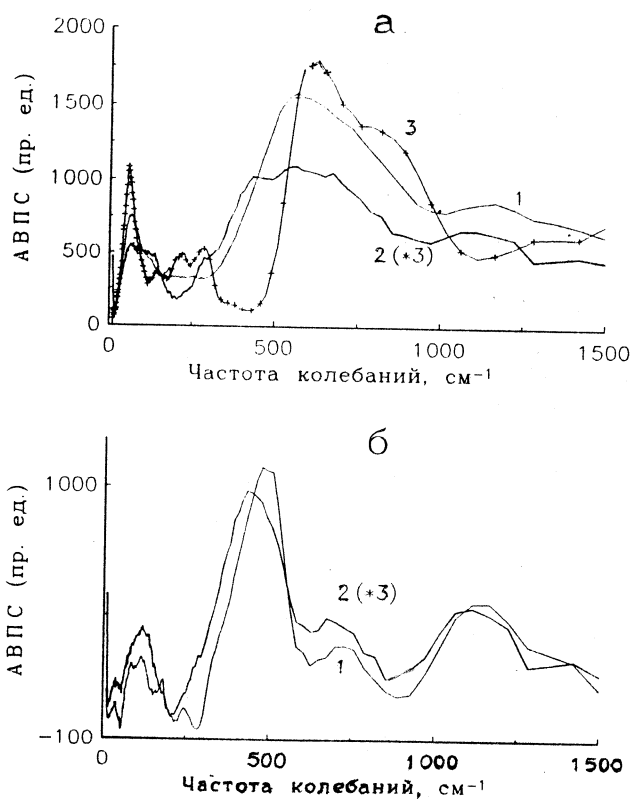


Рис.13. Базисные спектры АВПС водных компонентов силикагелей, 10К [26]: 1) силикагель СГ20, 2) силикагель СГ100, 3) быстрозамороженная вода; а — водные компоненты, б — адсорбированная вода

базисные спектры исследованных образцов силикагелей существенно различны. Это обстоятельство, отнесенное к плохой воспроизводимости спектров поглощения силикагелей, было отмечено и при изучении их ИК-поглощения [8,11,12]. Как будет показано в п.7.2, это различие не связано с различием в численном параметре, описывающем размеры пор, но определяется исключительной лабильностью структуры силикагелей. Вследствие чего воспроизводимость спектров при переходе от одного образца силикагеля к другому оказывается практически принципиально невозможной.

Вторая особенность касается базисных спектров водных оболочек. В отличие от аэросила с глобулярной структурой в пористых структурах

силикагелей вода может не только адсорбироваться, но и удерживаться в квазисвободном виде. Поэтому, характеризуя водный компонент этого вещества, будет более точным говорить об удерживаемой воде. На рис.13 приведены базисные спектры АВПС водных компонентов силикагелей СГ20 и СГ100 совместно со спектром *б/замороженной воды*. Несмотря на хорошо заметное различие спектров водных компонентов обоих образцов обращает на себя внимание значительное подобие обоих спектров спектру *б/замороженной воды*. Столь очевидное сходство, которое наблюдалось и другими авторами [45,56] (см. п.2.2, рис.3—5), подтверждает приведенное выше заключение о наличии в порах силикагеля воды двух типов: адсорбированной на внутренней поверхности пор и квазисвободной.

В соответствии с этой точкой зрения было предположено [26], что базисные спектры 1 и 2 на рис.13,а являются составными и состоят из спектров адсорбированной и квазисвободной воды. Тогда наблюдаемое различие спектров воды в силикагелях СГ20 и СГ100 получает качественное объяснение. В мелкопористом силикагеле СГ20 воды больше, около 16 весовых процентов (известно, что чем меньше пора, тем больше воды удерживается в ней вследствие увеличения сил поверхностного натяжения [1]), и основную часть ее составляет квазисвободная вода. Именно поэтому спектр АВПС водного компонента СГ20 в этом случае столь похож на спектр *б/замороженной воды*. В силикагеле СГ100 из-за большего размера пор воды удерживается меньше (около 5 весовых процентов), и поэтому в ее спектре АВПС проступает практически полностью замаскированный в первом случае спектр адсорбированной воды*. На основе этого качественного анализа при использовании разностно-корреляционного метода разложения спектров сложной системы были получены отдельно спектры обоих типов воды. При этом предполагалось, что квазисвободная вода и адсорбированная вода пространственно разделены. Под адсорбированной водой, как и в случае аэросила, подразумевались сложные структурные образования, включающие молекулы воды, взаимодействующие с центрами адсорбции. Полагалось также, что системы внутренних координат адсорбированной и квазисвободной воды независимы, так что их колебательные спектры не должны быть скоррелированы, если не принимать во внимание ложную корреляцию, вызванную случайным совпадением частот колебательных мод.

Процедура разложения исходных базисных спектров водных компонентов заключалась в следующем [26]. В соответствии с (16) можно составить систему уравнений

*Аналогичное заключение сделано авторами работы [45], см. рис.3 и 4.

$$\begin{aligned}
 Sp^{(1)}(\omega) &= Sp_1(\omega) + Sp_2(\omega), \\
 Sp^{(2)}(\omega) &= \alpha_1 Sp_1(\omega) + \alpha_2 Sp_2(\omega), \\
 Sp^{(3)}(\omega) &= \beta Sp_1(\omega),
 \end{aligned}
 \tag{30}$$

где индекс j нумерует исходные спектры в следующем порядке:

$j = 1$, базисный спектр АВПС водной оболочки $Sp_1^{(1)}$ силикагеля СГ20 (кривая 1 на рис.13,а);

$j = 2$, базисный спектр АВПС водной оболочки $Sp_1^{(1)}$ силикагеля СГ100 (кривая 2 на рис.13,а);

$j = 3$, спектр АВПС 1 грамма б/замороженной воды (кривая 3 на рис.13,а).

Sp_1 и Sp_2 в (30) обозначают базисные спектры квазисвободной и адсорбированной воды, которые полагаются одинаковыми в обоих силикагелях. На основании работ [55,56], утверждающих, что спектры НРН свободного льда и льда в порах практически сохраняются, было предположено, что спектр колебаний свободной воды $Sp^{(3)}$ определяет форму базисного спектра Sp_1 .

Если построить два разностных спектра

$$\begin{aligned}
 DSp^{(13)} &= Sp^{(1)} - a^{(13)} Sp^{(3)}, \\
 DSp^{(23)} &= Sp^{(2)} - a^{(23)} Sp^{(3)}
 \end{aligned}
 \tag{31}$$

и потребовать выполнения критерия НКК в виде

$$\begin{aligned}
 C(DSp^{(13)}, Sp^{(3)}) &= 0, \\
 C(DSp^{(23)}, Sp^{(3)}) &= 0,
 \end{aligned}
 \tag{32}$$

то, решая эти уравнения, можно определить в соответствии с (15) коэффициенты $a_0^{(13)}$ и $a_0^{(23)}$ и получить спектры $a_0^{(13)} Sp^{(3)} = Sp_2^{(1)}$ и $a_0^{(23)} Sp^{(3)} = Sp_2^{(2)}$. Эти спектры приведены на рис.13,б. Они оказались практически тождественными. В табл.3 приведено процентное содержание свободной ($\eta_{св}$) и адсорбированной ($\eta_{ад}$) воды в исследованных образцах силикагелей, соответствующие значениям коэффициентов $a_0^{(13)}$ и $a_0^{(23)}$ в уравнениях критерия НКК (32).

Однако сам факт одинаковости спектров АВПС адсорбированной воды в обоих силикагелях кажется удивительным на фоне большого различия двух других их базисных спектров. По-видимому, в основе этого факта

Таблица 3. Процентное содержание в силикагелях квазисвободной и адсорбированной воды [26]

Образец	$\eta_{\text{св}}$	$\eta_{\text{ад}}$
Силикагель СГ20	14,0	3,7
Силикагель СГ100	1,8	1,3

лежит конкуренция двух процессов: образования «капли» квазисвободной воды и адсорбции. Очевидно, что среди набора кремний-гидроксильных центров трех типов (от силанольного до силантриольного), формирующих гидроксильную оболочку силикагеля и обеспечивающих адсорб-

цию воды, лишь один центр может оказаться конкурентоспособным (иначе вода не собиралась бы в капли). Естественно, что этот центр один и тот же у каждого из силикагелей, располагающих полным набором, что и обуславливает одинаковость спектров АВПС адсорбированной на нем воды. Как будет показано в п.7.2, это объяснение получает обоснованное подтверждение в процессе квантово-химического моделирования модельных структур силикагелей.

4.3. Аэрогель. а) *Образцы и исходные спектры.* Исследованный образец аэрогеля АГ200 [27] представлял собой монолитный кусок твердого вещества с массовой плотностью 200 кг/м^3 . Хранившийся на воздухе образец является исходным *воздушно-сухим*. Этот образец был подвергнут сушке на воздухе при температуре 100°C в течение 7 суток, в результате чего был получен *высушенный* образец. В этом образце, в свою очередь, был произведен изотопный $\text{H} \rightarrow \text{D}$ обмен. Образец выдерживался в течение 12 часов при 100°C в атмосферных условиях и затем помещался в эксикатор, где выдерживался в течение 12 часов в парах тяжелой воды. Цикл был повторен со временем выдерживания на обоих этапах 6 часов, в результате чего был получен *дейтерированный* образец. Времяпролетные спектры НРН семейства указанных образцов аэрогеля и соответствующие спектры АВПС, полученные в соответствии с (6), приведены на рис.14.

б) *Базисные спектры компонентов аэрогеля.* В отличие от аэросила и силикагелей химия поверхности аэрогеля значительно менее исследована. Первоначальные суждения о структуре поверхности аэрогеля были сделаны на основе анализа химико-технологического процесса его получения. В соответствии со схемой этого процесса [3] основным компонентом остова аэрогелей является силоксановая цепочка, а главный вклад в водородосодержащую поверхностную зону вносят гидроксильные группы, увеличение числа которых сопровождается ростом длины полимерной цепочки. Эти группы призваны компенсировать свободные валентности атомов кремния силоксанового каркаса цепочки.

У изолированных цепочек каждый атом кремния силоксанового каркаса связан с двумя гидроксильными группами. Таким образом, образующаяся

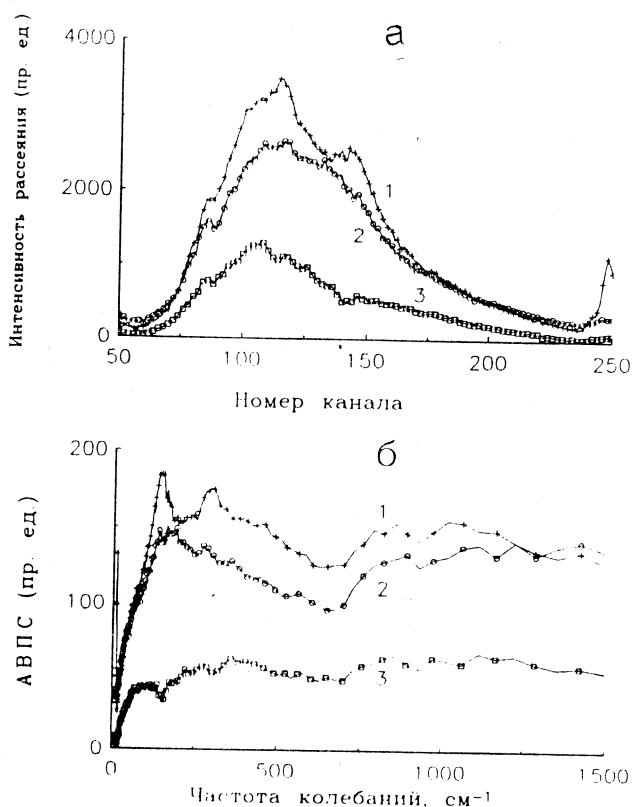


Рис.14. Экспериментальные колебательные спектры семейства аэрогеля АГ200, 10К [27]: 1) *воздушно-сухой образец*, 2) *высушенный образец*, 3) *дейтерированный образец*; а — *временнóе-пролетные спектры НРМ*, б — *спектры АВРС*

полимерная структура представляет собой цепочку силандиольных групп. Если же цепочки попарно сшиваются, образуя ленту, то атомы кремния этой ленты связываются уже только с одной гидроксильной группой; иными словами, внешними гидроксильными центрами являются силанолы. Предполагается, что при гелеобразовании происходит именно такой процесс сшивания [3].

Наличие на поверхности кремнеземного остова силанольных или силандиольных групп обычно приводит в атмосферных условиях к адсорбции воды. Существование адсорбированной воды на поверхности аэрогеля подтверждается масс-спектрометрическим исследованием продуктов, десор-

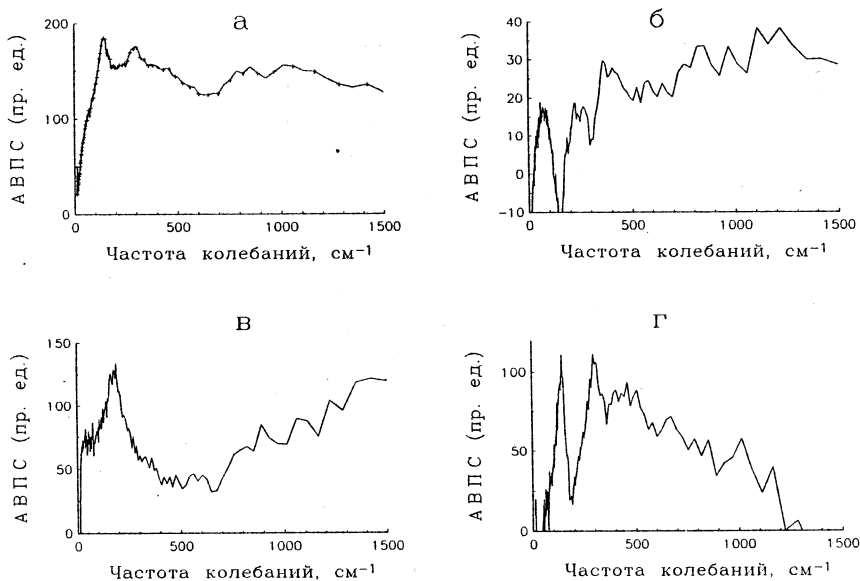


Рис.15. Базисные спектры АВПС компонентов аэрогеля АГ200, 10К [27]: а) суммарный спектр *воздушно-сухого* образца; б) остов, в) гидроксильная оболочка, г) адсорбированная вода

бирующих с его поверхности при нагревании до 100—150°C [3]. Об этом же говорит и анализ приведенных на рис.14 колебательных спектров. Как видно из рисунка, при высушивании образца в условиях, отвечающих преимущественной десорбции воды, спектр его колебаний существенно видоизменяется и его интегральная интенсивность уменьшается почти вдвое. Одновременно с этим сравнение спектров АВПС внутри семейства образцов АГ200 показывает, что выдерживание исходного образца АГ200 в парах тяжелой воды почти втрое понижает интенсивность спектра. Последнее наблюдение непосредственно свидетельствует о том, что поверхностная зона *воздушно-сухого* аэрогеля содержит значительное количество атомов водорода, поскольку изотопный обмен сосредоточен, в основном, в этой зоне. Другим подтверждением наличия воды в поверхностной зоне аэрогеля можно считать значительное размытие структуры спектра при повышении температуры [27], подобное наблюдаемому для спектров *воздушно-сухих* образцов аэросила и силикагеля [22], которое связывается с облегчением диффузии воды по поверхности при росте температуры.

Таким образом, поверхностная зона *воздушно-сухого* аэрогеля содержит гидроксильные группы и адсорбированную воду. Вследствие этого аэрогель

по аналогии с другими дисперсными кремнеземами является трехкомпонентной системой, состоящей из кремнеземного остова, гидроксильного и водного компонентов.

Соотношение коэффициентов в системе уравнений (16), описывающей три экспериментальных спектра образцов аэрогеля, оказалось полностью аналогичным соотношениям для силикагелей, и поэтому система (29) является базовой и для аэрогеля. Полностью повторяя процедуру, описанную в п.4.2 для силикагеля, можно получить набор базисных спектров аэрогеля, которые приведены на рис.15 совместно со спектром *воздушно-сухого* образца. При рассмотрении спектров обращает на себя внимание их ярко выраженная «квазимолекулярная» структура. Что касается спектра колебаний остова, то его структура более характерна для полимеров, чем для плотно упакованного аморфного твердого тела (см., например, [89]). Это согласуется с цепочечной моделью остова аэрогеля, являющейся следствием специфических процессов полимеризации и конденсации при получении этого дисперсного кремнезема [90]. Узкополосность спектров адсорбированной воды свидетельствует, с одной стороны, об отсутствии коллективного взаимодействия между молекулами и, с другой стороны, об однотипности ориентации их посадки на поверхности. Последнее, в свою очередь, говорит об определенном униформизме центров адсорбции и о достаточной разнесенности этих центров в пространстве.

5. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ДИСПЕРСНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ И ИХ КОМПОНЕНТОВ

5.1. Колебательные спектры кремнеземных остовов. Базисные спектры колебаний остовов исследованных кремнеземов приведены на рис.16. В дополнение к этим спектрам на рис.16,а (кривая 2) приведен спектр колебаний стекла, полученного спеканием аэросила А380. Из рисунка видно, что спектры остовов всех веществ, несомненно, имеют общий рисунок и похожи на спектр стекла, представляющий спектр объемных колебаний плотноупакованного кремнезема, в том смысле, что каждый из них состоит из четырех полос, расположенных в одних и тех же спектральных областях. Вместе с тем наблюдаются как значительные различия между спектрами различных дисперсных кремнеземов, так и отличия их от спектра стекла. Это касается распределения интенсивности в каждом из спектров, т.е. формы спектра и абсолютных интенсивностей каждого из них. Наиболее близок к спектру стекла спектр колебаний остова аэросила. Наиболее далек от него спектр колебаний аэрогеля. Обращает на себя особенное внимание тот факт, что спектры остовов двух исследованных силикагелей СГ100 и

СГ20 с различным средним размером пор (100 и 20 Å) существенно разнятся между собой.

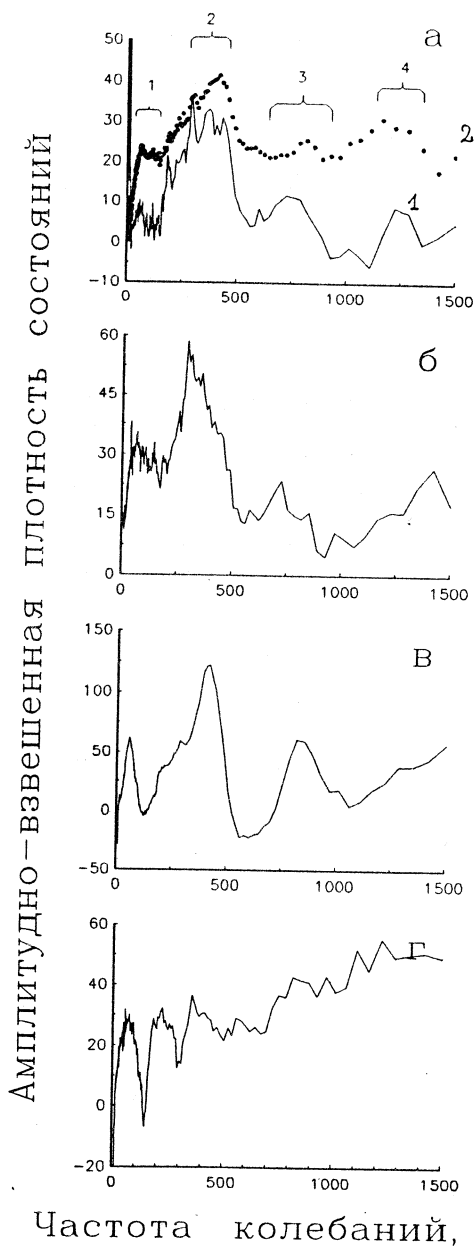
Анализ различий, наблюдаемых в форме спектров, удобно начать с краткого описания спектра стекла. В этом спектре отчетливо выделяются четыре полосы в областях $0 + 200 \text{ см}^{-1}$ (1), $200 + 500 \text{ см}^{-1}$ (2), $500 + 950 \text{ см}^{-1}$ (3) и $950 + 1300 \text{ см}^{-1}$ (4). В соответствии с анализом спектра колебаний свободного иона SiO_4^- [6] и кристалла α -кварца [91] основной вклад в область 2 вносят деформационные колебания, связанные с изменением угла O-Si-O. В областях 3 и 4 такую роль выполняют симметричные и несимметричные валентные колебания связи Si-O. Расчет колебательного спектра ряда больших модельных кластеров показывает (см. п.7.1), что это отнесение может быть распространено и на аморфные структуры. В соответствии с расчетом область 1 колебательного спектра остова формируется колебательными модами трансляционного движения атомов и деформационными колебаниями, связанными с изменением углов Si-O-Si. Отнесение частот в областях 2—4 согласуется с приведенным выше.

Аэросильное стекло и аэросил. Как уже говорилось, спектры этой пары (см. рис.16,а) наиболее подобны. Аналогичное явление было отмечено и в спектрах ИК-поглощения [39]. Этот факт с несомненностью свидетельствует о том, что структура остова аэросила является плотноупакованной. В спектрах АВПС стекла наблюдается заметное превышение интенсивности над спектром аэросила в областях $0 + 220$ и $560 + 1500 \text{ см}^{-1}$. Подробный анализ разностного спектра в этой области позволил предположить [25], что эта разность обусловлена наличием в стекле, в отличие от «абсолютно сухого» (по определению) остова аэросила, небольших количеств адсорбированной воды. Для количественного объяснения наблюдаемой разности достаточно 0,3—0,5 весовых процентов воды*. Возможность существования таких количеств воды в стекле подтверждается рядом химических свидетельств [6].

Силикагели. В базисных спектрах остовов силикагелей (см. рис.16,б и в) по-прежнему отчетливо выделяются области 1—4. Однако обращает на себя внимание существенная перестройка спектров и увеличение их интенсивности по сравнению со спектром аэросила. Главной особенностью этих спектров, как сказано выше, является их различие для разных силикагелей. В наибольшей степени оно проявляется в областях 1 и 2, отвеча-

*Достаточность столь малого количества воды для объяснения почти 50%-ного эффекта в спектрах АВПС на рис.16,а обусловлена исключительно высокой чувствительностью интенсивности НРН к наличию атомов водорода вследствие большой амплитуды рассеяния нейтронов на атомах протия.

Рис.16. Базисные спектры колебаний остовов дисперсных кремнезёмов, $T = 10$ К [28]: а) аэросил А380 (1) и стекло (2); б, в) силикагели СГ100 и СГ20 соответственно, г) аэрогель АГ200



ющих деформационным колебаниям, связанным с изменением углов Si-O-Si и O-Si-O. Эти изменения можно понять, если предположить, что в силикагелях существует достаточно широкое распределение возможных углов Si-O-Si и O-Si-O и что при переходе от одного образца к другому форма этого распределения меняется. Изменения в области деформационных колебаний сопровождаются значительными изменениями и в областях 3 и 4 валентных колебаний связей Si-O. Совокупность этих фактов позволяет сделать заключение о различии структур исследованных силикагелей между собой и о значительном отличии их структур от плотноупакованной.

Аэрогель. Главной особенностью базисного спектра колебаний остова аэрогеля (см. рис.16,г) является его узкополосная «квази-молекулярная» структура, в связи с чем он подобен

спектру колебаний полимеров [89]. В то же время узкополосная структура базисного спектра в областях 1 и 2 свидетельствует об узких распределениях деформационных мод в области изменений углов в кремний-кислородных тетраэдрах, что, в свою очередь, говорит о квазирегулярной структуре вещества. Следовательно, остов аэрогеля представляет собой новый вид структуры в дополнение к структурам аэросила и силикагелей.

Таким образом, сравнительный анализ базисных спектров колебаний остовов исследованных кремнеземов позволил сделать несомненный вывод о качественном различии структур исследованных веществ, тем самым свидетельствуя о наличии нескольких полиморфных модификаций дисперсного аморфного кремнезема. Различие остовных структур повлекло за собой и различие в структуре поверхностных зон исследованных веществ.

5.2. Спектры колебаний гидроксильных компонентов. Базисные спектры колебаний гидроксильных компонентов обсуждаемого набора дисперсных кремнеземов приведены на рис.17. Во всех спектрах, несмотря на значительные различия между ними, можно выделить характерные и общие для них две области колебаний $0 + 380 \text{ см}^{-1}$ (1) и $700 + 1100 \text{ см}^{-1}$ (2). Различия спектров можно объяснить, таким образом, различием структур в этих областях, а также величиной интенсивности непрерывного спектра-подложки и абсолютной интенсивностью.

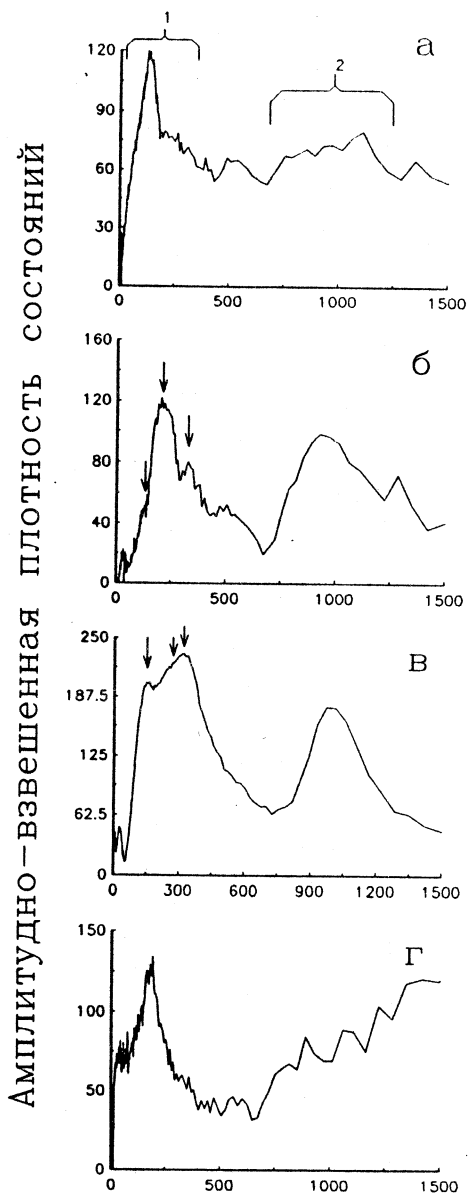
В соответствии с приводимыми ниже в п.7.1 результатами расчета спектра колебаний кластеров, в колебательные моды, отвечающие выделенным областям 1 и 2, преимущественный вклад вносят торсионные колебания группы ОН относительно связи Si-OH (область 1) и деформационные колебания этой связи (область 2). Третьим структурным элементом базисных спектров гидроксильных компонентов являются оцувствленные гидроксильными группами (точнее, атомами протия этих групп) колебания поверхностных атомов кремнеземного ядра. В основе этого эффекта оцувствления лежит уже упоминавшийся ранее «эффект всадника» [18,19], заключающийся в следующем. Атомы протия, связанные с атомами кислорода гидроксильных групп, участвуют и в других колебательных модах, описывающих, например, деформацию углов Si-O-Si и O-Si-O, валентные и деформационные колебания связей Si-O и т.д. Из-за аномально высокой чувствительности нейтронного рассеяния к атомам протия происходит оцувствление поверхностных колебаний остова, в связи с чем в спектрах АВПС гидроксильных компонентов кремнеземов возникает соответствующая подложка, близкая по своей форме к спектрам, показанным на рис.16. Количественно этот эффект рассматривается ниже в п.7.1.

Узкополосность спектров колебаний гидроксильных компонентов аэросила и аэрогеля в области 1 говорит об определенной однородности ориентаций групп ОН относительно связывающих их атомов кремния. Из этого

Рис.17. Базисные спектры колебаний гидроксильных компонентов дисперсных кремнеземов, $T = 10$ К [28]: а) аэросил А380, б, в) силикагели СГ100 и СГ20 соответственно, г) аэрогель АГ200

же можно сделать вывод о преимущественно одном типе гидроксильных групп на поверхности обоих веществ. Это наблюдение согласуется с результатами исследований структуры гидроксильного покрова аэросила [5], в результате которых было установлено, что 80—85% поверхностных гидроксильных групп являются силанольными. Близость первых пиков в спектрах аэросила и аэрогеля по положению в шкале частот и по форме позволяет предположить, что и на поверхности аэрогеля главную роль играют силанольные группы.

В отличие от спектров гидроксильных компонентов аэросила и аэрогеля, спектры колебаний этих компонентов в силикагелях обладают сложной структурой в области 1 и интенсивным, хорошо выраженным пиком в области 2. При сравнении их между собой опять обращает на себя внимание



Частота колебаний, см^{-1}

различие спектров колебаний гидроксильных компонентов разных образцов. Спектр гидроксильных колебаний в силикагеле СГ20 вдвое интенсивнее спектра силикагеля СГ100. Основные структурные отличия сосредоточены в области 1. Их можно сформулировать как перераспределение интенсивности между тремя характеристическими пиками на частотах 80, 230 и 380 см^{-1} , наблюдающимися в обоих спектрах и отмеченными на рис.17,б и в стрелками. Положение первого пика совпадает с положением пиков в спектрах колебаний аэросила и аэрогеля.

Качественное объяснение наблюдаемым особенностям спектров колебаний гидроксильных компонентов силикагелей было дано на основе анализа возможной структуры гидроксильной оболочки кремнезёмов [28]. Гидроксильные компоненты этих веществ могут быть образованы кремний-гидроксильными группами трех типов: силанольной $(\text{OH})_1$, силандиольной $(\text{OH})_2$ и силантриольной $(\text{OH})_3$. Все эти группы обладают близкими по частоте деформационными колебаниями связи Si-OH [5]. Поэтому в спектрах колебаний гидроксильного компонента любого состава должна присутствовать полоса в области 1000 см^{-1} , что и наблюдается в спектрах на рис.17. Обращает на себя внимание тот факт, что в спектрах силикагелей эта полоса выражена гораздо ярче, чем в спектрах аэросила и аэрогеля.

Колебательный спектр гидроксильного компонента аэросила является, по существу, спектром колебаний силанольных групп. Отличие этого спектра от спектра колебаний гидроксильных компонентов силикагелей может расцениваться как свидетельство того, что силанольные группы, если они и наличествуют в гидроксильном компоненте силикагеля (о чем, возможно, говорит присутствие в спектрах силикагелей пика с максимумом при 80 см^{-1}), все же не являются основным элементом. Таким образом, следует сделать вывод о том, что в формировании гидроксильных компонентов силикагелей должны участвовать силандиольные и силантриольные группы. О возможном наличии таких групп в рыхлой структуре силикагеля уже сообщалось ранее [40].

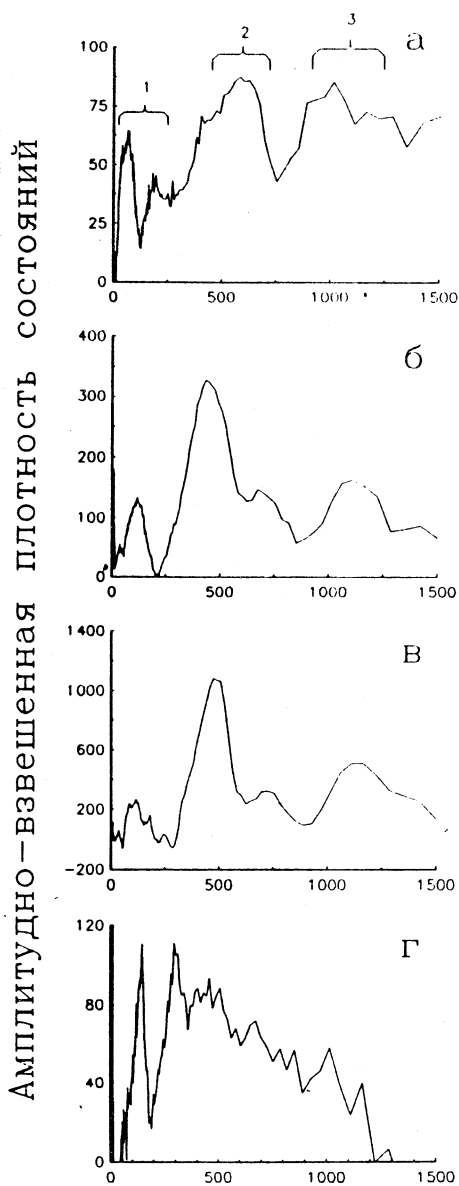
Таким образом, гидроксильный компонент силикагеля образуется совокупностью разных кремний-кислородных групп, весовые факторы которых зависят от структуры кремнезёмного остова. Вследствие этого различие структур кремнезёмных остовов обоих силикагелей, что было установлено в предыдущем разделе, определяет и различие структур гидроксильных компонентов. Это различие можно описать как перераспределение весовых факторов кремний-кислородных групп различных типов при переходе от одного силикагеля к другому.

5.3. Спектры колебаний адсорбированной воды. На рис.18 представлены базисные спектры колебаний водных компонентов аэросила и аэрогеля,

Рис.18. Базисные спектры колебаний водных компонентов дисперсных кремнеземов, $T = 10$ К [28]: а) аэросил А380, б, в) силикагели СГ20 и СГ100 соответственно, г) аэрогель АГ200

представляющих спектры адсорбированной воды, и спектры воды, адсорбированной на силикагелях, экстрагированные (см. п.4.2) из базисных спектров их водных компонентов [26].

Как показывают результаты последнего квантово-химического расчета взаимодействия воды с изолированным силанольным центром [92], характер колебательных мод существенно меняется при изменении числа присоединяемых к центру молекул воды. В случае одиночной молекулы спектры колебаний координированной атомом кремния молекулы [93] и молекулы, связанной с центром водородной связью, ярко характеристичны. Когда число присоединяемых молекул достигает шести, то суммарный спектр приобретает черты, свойственные обоим указанным выше характеристическим спектрам. При этом, одна-



Частота колебаний, см⁻¹

ко, в соответствии с анализом колебательных мод [92] адсорбционный комплекс колеблется как единое целое, в котором структурно выделяемые координированные и водородно-связанные молекулы динамически не различаются. Отсылая читателя за деталями этого анализа в [92], ниже для простоты изложения используем характеристичность колебательных спектров одиночных молекул воды для качественного описания спектральных особенностей в спектрах на рис.18.

В приведенных спектрах можно выделить три спектральных интервала. В низкочастотной области $0 + 350 \text{ см}^{-1}$ (1) располагаются частоты валентных колебаний групп $\text{Si}\dots\text{OH}_2$, торсионные колебания этих групп и деформационные колебания водородных связей взаимодействующих молекул воды. Область средних частот $350 + 850 \text{ см}^{-1}$ (2) характеризуется интенсивным структурным пиком и обусловлена главным образом деформационными колебаниями водородных связей. Этот пик является основным структурным элементом в спектре быстрозамороженной воды (см. рис.13,а). Высокочастотная область спектра $850\text{—}1200 \text{ см}^{-1}$ содержит два пика, которые связаны с деформационными колебаниями координированной атомом кремния молекулы воды и деформационными колебаниями связи Si-OH группы, которая входит в центр адсорбции.

На основе приведенного отнесения колебательных мод был произведен структурно-динамический анализ адсорбированной воды в исследованных кремнеземах [28]. Спектр адсорбированной воды на аэросиле получил свое объяснение в предположении, что адсорбция воды на его поверхности носит коллективный характер со стороны молекул воды, т.е. молекулы воды образуют в процессе адсорбции «квазикаплю» на силанольном центре [24,28,92]. Это предположение полностью подтверждается расчетами равновесных конфигураций молекул воды на больших кластерах, моделирующих структуру аэросила (см. п.7.1).

Спектр адсорбированной воды в силикагеле (рис.18,б и в) существенным образом отличается от спектра воды в аэросиле. Этот факт свидетельствует о том, что природа центров, ответственных за адсорбцию воды в этих кремнеземах, различна, что находится в полном согласии с выводом, сделанным в предыдущем разделе. На основе анализа спектра адсорбированной воды в силикагеле с точки зрения отнесения частотных областей 1—3 [28] были сделаны следующие заключения. Как и в случае аэросила, адсорбция воды в силикагеле происходит коллективно, поскольку доминирующим в спектре колебаний является двугорбый пик в области 2. Форма этого пика подобна форме аналогичного пика в спектре быстрозамороженной воды (см. рис.13,а), однако пик сдвинут в низкочастотную область и имеет другое соотношение интенсивностей его составляющих. Это может быть естественным следствием связывания «капли» воды с адсорбционным центром. Из

сравнения спектров адсорбированной воды на аэросиле и силикагеле видно, что такое связывание капли в случае силикагеля слабее, чем в случае аэросила. В спектре адсорбированной на силикагеле воды отсутствует пик при 900 см^{-1} , что указывает на практическое отсутствие координационно-связанной воды на его поверхности. Большая ширина пика в области 1, как и в случае аэросила, свидетельствует о коллективном характере адсорбции воды. Отмеченный ранее удивительный факт совпадения спектров адсорбированной воды для обоих силикагелей получает в связи с проведенным выше анализом, а также анализом структуры гидроксильных оболочек силикагелей, естественное объяснение. Поскольку, как показано в предыдущем разделе, эти оболочки состоят из набора трех кремний-гидроксильных групп, а именно $(\text{OH})_1$, $(\text{OH})_2$ и $(\text{OH})_3$, то молекула воды взаимодействует с каждой из этих групп независимым образом, в связи с чем возникает их конкуренция по отношению к адсорбции воды. В таких условиях побеждает «сильнейшая», отвечающая в данном случае наибольшей энергии связи молекул воды с центром. Поскольку эта сильнейшая группировка является одной из трех, указанных выше, то она должна быть одной и той же как для силикагеля СГ100, так и для силикагеля СГ20. Таким образом, спектры адсорбированной воды должны быть одинаковыми для обоих силикагелей, а их различие сводится только к различию их абсолютных интенсивностей, что связано с долей селективированных таким образом центров адсорбции на поверхности силикагелей.

Спектр АВПС адсорбированной на аэрогеле воды (рис.18,2) разительным образом отличается от приведенных выше спектров. В первую очередь, следует констатировать отсутствие в этом спектре хорошо выраженного интенсивного пика в области 2, что говорит о существенном снижении числа водородных связей между молекулами воды на поверхности аэрогеля. Поэтому предположили в [28], что слой адсорбированной воды в этом случае образуется не каплями, как в случае аэросила и силикагеля, а преимущественно изолированными молекулами. Это заключение подтверждается также ярко выраженной структурностью спектра колебаний в низкочастотной области 1, вид которой характерен для локализованных индивидуальных состояний. Положение максимумов пиков в этой области близко, тем не менее, к положению максимумов пиков в спектре аэросила (рис.18,а). Это говорит о том, что главным центром адсорбции воды в аэрогеле является силанольная группа, что находится в полном соответствии с выводами предыдущего раздела. Это заключение может подтвердить и наличие максимума при 900 см^{-1} в спектре. Он менее ярко выражен по сравнению со спектром воды в аэросиле, но наблюдается достаточно надежно. По мнению авторов [28], изменение соотношения интенсивностей в максимумах в спектрах воды в этих двух аэрокремнеземах отражает принципиально раз-

ный характер адсорбции в них: коллективный в случае аэросила и индивидуальный в случае аэрогеля. Последнее заключение кажется вполне естественным, если вспомнить, что в случае аэросила адсорбция происходит на свободной внешней поверхности малых частиц. Стерические препятствия для образования капли могут определяться плотностью силанольных групп на поверхности. Как установлено экспериментально, эта плотность такова, что соответствует среднему расстоянию между силанольными центрами $7 \text{ \AA}$ [6]. Этого расстояния достаточно для формирования на изолированном силанольном центре квазикапли, состоящей из нескольких молекул воды. В противоположность этому активная поверхность аэрогеля является внутренней [3], в связи с чем при образовании квазикапли возрастает роль стерических препятствий.

Представленный выше сравнительный анализ базисных спектров компонентов исследованных дисперсных кремнеземов, несмотря на его качественный характер, позволили надежно установить тот факт, что аэросилы, силикагели и аэрогели следует рассматривать как принципиально различные структурные образования. При этом важно отметить, что эти различия распространяются как на объемные, остовные, структуры, так и на структуры поверхностных зон этих веществ. Поскольку рассматриваемые вещества отличаются лишь технологией производства, наблюдаемая структурная вариантность представляет собой явление *технологического полиморфизма* в аморфном дисперсном кремнеземе.

6. ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОЛИМОРФИЗМ И КЛАССИФИКАЦИЯ ДИСПЕРСНЫХ АМОРФНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ

Установление факта наличия технологического полиморфизма в среде аморфных дисперсных кремнеземов важно как само по себе, так и как основа для совершенно нового подхода к постановке задачи о вычислительном моделировании этих веществ. Для выработки этого подхода понадобилось классифицировать обнаруженные модификации, сформулировав для каждой из них набор отличительных признаков и введя определенные численные классификационные параметры [32]. Эту программу удалось выполнить, используя основные кристаллохимические критерии, предложенные Либау [94].

6.1. Основы кристаллохимии силикатов. В фундаментальном труде Ф.Либау [94] было показано, что силикаты в большей степени, чем любая другая группа химических соединений (за исключением органических соединений углерода), характеризуются чрезвычайно высокой вариабельностью химических и структурных свойств. Вместе с тем в результате

анализа около 1000 соединений было установлено, что, несмотря на это обстоятельство, силикаты могут быть разделены на небольшое число классов и подклассов в соответствии с классификацией, основанной на нескольких следующих достаточно простых кристаллохимических принципах.

1. Поскольку во всех исследованных силикатах наиболее прочной является связь Si-O, то основным фрагментом, определяющим структуру силиката, является полиэдр $[\text{SiO}_n]$, а тип структуры определяется теми способами, которыми эти полиэдры связаны между собой.

2. Координационное число кремния (КЧ) в соединениях кремния с общей формулой $\text{M}_x\text{Si}_y\text{A}_z$ и связями Si-A-M имеет тенденцию к увеличению $\text{КЧ} > 4$, и тем сильнее, чем выше электроотрицательность ближайших соседей — атомов А. Кислород имеет промежуточное значение электроотрицательности и может входить как в тетраэдры SiO_4 , так и в октаэдры SiO_6 . Тетраэдры предпочтительнее. Так, из 874 исследованных силикатов лишь в 16 обнаружены октаэдрические анионы.

3. Тетраэдры $[\text{SiO}_4]$ связываются друг с другом чаще всего через вершины, а не ребра или грани.

4. Один атом кислорода может принадлежать не более чем двум тетраэдрам $[\text{SiO}_4]$.

5. Для данного силикатного аниона разность Δs между значениями s всех тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ (где s — число сочленений, т.е. количество атомов кислорода в тетраэдре $[\text{SiO}_4]$, объединенных с другими тетраэдрами $[\text{SiO}_4]$), имеет тенденцию к уменьшению.

6. Длины связей и валентные углы отклоняются как можно меньше от средних значений:

$$\langle d(\text{Si}-\text{O}) \rangle = 1,62 \text{ \AA}, \quad \langle \text{угол}(\text{O}-\text{Si}-\text{O}) \rangle = 109,47^\circ,$$

$$\langle \text{угол}(\text{Si}-\text{O}-\text{Si}) \rangle = 140^\circ.$$

Эти шесть правил не являются законами природы, и известны исключения из них [94], но тем не менее нарушение этих правил в большинстве случаев энергетически невыгодно и поэтому маловероятно.

Для описания способов связи тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ между собой в силикатах введен ряд параметров. Не перечисляя всех, остановимся на важных для дальнейшего, а именно *размерности* и *кратности*. Размерность силикатных тетраэдрических структур D характеризует тип упаковки в исходных структурных единицах и имеет значения $D = 0, 1, 2, 3$. Так, изолированные тетраэдры $[\text{SiO}_4]$, а также изолированные кольцевые и некольцевые фрагменты имеют размерность $D = 0$. Для изолированных цепочек $D = 1$, для

Таблица 4. Химическая номенклатура силикатов [94]

Размерность D	Кратность M		
	1	2	3
0 Олигосиликаты	Моносиликаты	Дисиликаты	Трисиликаты
0 Циклосиликаты	Моноцикло- силикаты	Дициклосиликаты	Трициклосиликаты
1 Полисиликаты	Монополи- силикаты	Диполисиликаты	Триполисиликаты
2 Филлосиликаты	Монофилло- силикаты	Дифиллосиликаты	Трифиллосиликаты
3 Тектосиликаты	Тектосиликаты		

изолированных слоев $D = 2$ и для каркасов $D = 3$ [94]. Кратность M характеризует образование кратных тетраэдрических структур с той же самой размерностью, что и исходные структурные единицы (изолированные тетраэдры $[\text{SiO}_4]$, изолированные цепочки, изолированные кольца и изолированные слои).

В соответствии со значениями этих параметров вводится основная номенклатура силикатов, представленная в табл.4. Силикаты с изолированными тетраэдрами (одним, двумя, тремя) относятся к *олигосиликатам*. Силикаты, анионы которых представляют собой кольца, состоящие из тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, называются *циклосиликатами*. В зависимости от того, содержат ли они изолированные или двойные кольца или большее число колец, к их названию прибавляется приставка *моно-*, *ди-* и т.д. Структуры, содержащие силикатные цепочки, называются *полисиликатами*. Они могут далее подразделяться на *монополисиликаты* с изолированными цепочками, *диполисиликаты* с двойными цепочками, или лентами, и т.д. *Филлосиликаты*, образованные слоями тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, аналогичным образом могут далее подразделяться на *моно-* и *дифиллосиликаты*. Силикаты с трехмерным каркасом тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ называются *тектосиликатами*.

Возможность распределения силикатов по подклассам приведенной выше классификации определяется выполнением общего *принципа экономичности* (парсимонии), который предполагает, что для заданного состава система стремится иметь минимально возможное число геометрически и химически различающихся групп [94].

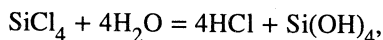
6.2. Классификация дисперсных кремнеземов в соответствии с кристаллохимией силикатов. Приведенные выше основные кристаллохимические правила не содержат в себе ничего специфического именно для крис-

таллической структуры, поэтому естественно предположить, что они выполняются и в случае аморфных структур [32].

В природе неизвестны кристаллические силикаты со смешанной размерностью и мультиплетностью. Это же, по-видимому, следует ожидать и для аморфного состояния. Вследствие этого аморфные структуры также можно классифицировать в соответствии с табл.4. Специфической особенностью исследованных веществ оказался тот факт, что установление классификационной моды для каждого из них оказалось возможным при анализе технологической процедуры их получения [32].

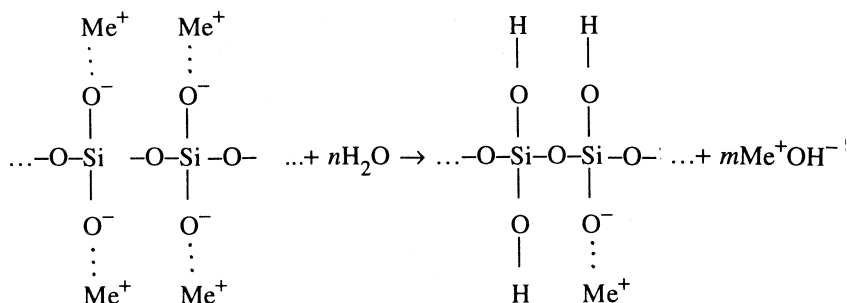
Дисперсные кремнеземы получают в условиях одновременного протекания и конкуренции двух процессов: гидролиза исходного продукта, приводящего к образованию кремнекислородных тетраэдров, содержащих от одной до четырех гидроксильных групп, и последующей поликонденсации этих фрагментов [1—3]. В результате поликонденсации образуется зародыш будущей структуры конечного продукта: частицы аэросила, золя силикагеля, элемента капиллярной структуры аэрогеля. Технологические процедуры отличаются исходными продуктами, подвергающимися гидролизу, средой, в которой осуществляются эти процессы, внешними условиями (температура, давление и т.д.).

Аэросил. При получении аэросила гидролизу подвергается четыреххлористый кремний, сам гидролиз осуществляется в кислородно-водородном пламени при атмосферном давлении и температуре около 2000 К. В результате гидролиза, протекающего в соответствии с реакцией



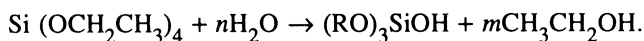
образуется ортосиликатная кислота, продуктом поликонденсации которой и является аэросил. Сформированные в области плазмы твердофазные зародыши выносятся из этой зоны и, попадая в холодную зону, образуют более крупные агломераты, которые представляют собой практически идеальные сферические частицы аморфного кремнезема. Процесс поликонденсации, образования зародышей и их агломерирования во многих чертах сходен с процессом получения малых частиц металлов [95].

Силикагель. Силикагель обычно получается из водных растворов силикатов щелочных металлов в присутствии кислоты [2]. Известно, что используемые силикаты уже в исходном состоянии содержат цепочки тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, которые, несомненно, являются заготовками будущей твердотельной структуры. Суть процесса можно представить на основе следующей упрощенной схемы:

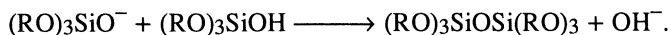
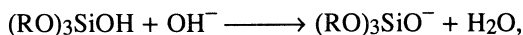


В водном растворе происходит гидролиз силиката металла, в результате которого образуются цепочки тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ разной длины, в которых каждый атом кремния связан с двумя гидроксидными группами. Известно, что в условиях высокой концентрации такие цепочки легко замыкаются, образуя циклы с различным числом атомов кремния. Гидроксил-анион способен разрывать связь $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$, объединяющую соседние тетраэдры, так что в растворе со временем устанавливается динамическое равновесие процессов образования и разрушения циклов. Для сдвига равновесия в пользу поликонденсации в раствор вводится кислота. При этом процесс разрушения циклов практически прекращается, и в среде идет активный процесс образования циклов и их слияния друг с другом. Обычно процесс первичного гидролиза идет не до конца, так что в циклах сохраняются отрицательные ионы кислорода, удерживающие вблизи цикла сольватированные положительные ионы металла. Как установлено [2], наличие подобных сольватированных ионов играет определяющую роль в процессе стабилизации геля.

Аэрогель. Основой технологического процесса промышленного изготовления этого продукта является катализированный либо кислотой, либо щелочью гидролиз тетраэтилортосиликата $[\text{Si}(\text{OCH}_2\text{CH}_3)_4]$ (ТЭОС) [90]:



Полученный в результате этой реакции «исходный силанол» может быть сложного состава в зависимости от состава R, который может быть либо атомом водорода H, либо этильной группой C_2H_5 . Одновременно с процессом гидролиза происходит конденсация образовавшихся «силанолов», завершающаяся образованием силикатного полимера по схеме:



Рост полимерной цепочки контролируется концентрациями воды, ТЭОС и pH раствора. При катализированных кислотой процессах образуются, как правило, короткие цепочки. Если катализатором является щелочь, то цепочки получаются длиннее. При соединении и взаимном сшивании цепочек образуется гель.

Таким образом, анализ технологических процессов получения различных дисперсных кремнеземов показывает, что структурные фрагменты, формирующие структуру будущего продукта, во всех трех случаях совершенно различны. Так, в случае аэросила очевидно, что при образовании его частиц реализуется «принцип плотной упаковки» тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ в объеме. В соответствии с классификацией Либау [94] размерность получаемой структуры равна $D = 3$, и по аналогии с тектосиликатами аэросил был отнесен к *аморфным тектокремнеземам* [32].

В случае силикагелей основу их структуры составляют кольцевые структуры достаточно произвольного состава, размерность которых $D = 0$, вследствие чего они были отнесены к *аморфным циклокремнеземам*, аналогичным циклосиликатам [32].

Основным структурным элементом каркаса аэрогеля являются цепочки. В этом случае размерность его структуры оказывается равной $D = 1$, в результате чего он был классифицирован как *аморфный поликремнезем*, аналогичный полисиликатам [32].

Таким образом, технологическими полиморфными формами дисперсных кремнеземов являются аморфные текто-, цикло- и полимодификации. Эти представления легли в основу качественного алгоритма, который был использован при конструировании модельных структур аморфных кремнеземов [32].

7. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСХОДНЫХ СТРУКТУР АМОРФНЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ

В течение последних нескольких лет активно разрабатывалась концепция вычислительного моделирования многоатомных систем, позволяющая в наибольшей степени приблизиться к описанию свойств реальных наноматериалов [15,31,36]. Основу этой концепции составляет совместный спектральный эксперимент, включающий в себя связанные обратной связью вычислительный и реальный эксперименты. Процесс моделирования рассматривается как синтетическая задача, успех решения которой определяется оптимальным выбором четырех ее основных компонентов, а именно: а) *квантово-химического метода расчета* многоатомных кластеров нанометрового размера; б) *способа реализации вычислений* на доступных мощных быстродействующих компьютерах; в) *структурно-чувствительного*

экспериментального метода для проверки правильности полученных результатов и г) *адекватного экспериментального объекта*, обеспечивающего установление обратной связи между расчетами и реальным экспериментом.

Необходимость оперирования с кластерами нанометрового размера приводит к естественному выводу в пользу одного из квантово-химических полуэмпирических методов. В последние годы наметился существенный прогресс в этой области благодаря как стимулирующим работам школы М.Дьюара [96], так и разработке новых методов расчета или новых версий уже существующих. К числу последних следует отнести авторские комплексы программ по вычислительной химии В.А.Заеца, основанные на методах MNDO, MNDO/H, AM1 (sp-базис) (CLUSTER-Z1) [97] и NDDO (spd-базис) (CLUSTER-Z2) [98]. Эти комплексы реализованы в форме, которая обеспечивает высокую точность расчета многоатомных систем при сравнительно небольших затратах вычислительного времени. Инсталлированные на персональные компьютеры класса PC AT 486/Pentium и SUN SPARCstation, они позволили осуществить за короткое время расчеты разнообразных многоатомных кластеров нанометрового размера таких систем, как кремнезем, нитрид кремния, никель, алюминий и др. (краткий обзор результатов см. в [36]).

Получение расчетных данных, однако, само по себе еще не решает задачу о вычислительном моделировании, так как возникает важный вопрос о соответствии этих данных физико-химической реальности. Нанометровые кластеры, которые используются в качестве модели, не имеют молекулярных аналогов, представляют собой «вещь в себе», рожденную нашей фантазией в меру здравого смысла и степени воображения. В силу этих обстоятельств основная характеристика молекулярной системы — энергия связи и другие интегральные характеристики становятся лишь описательными величинами и не могут быть подвергнуты экспериментальной проверке. Вследствие этого лишь колебательные спектры, которые преимущественно описываются короткодействующим взаимодействием, представляются именно тем свойством системы, по отношению к которому кластерное приближение является достаточно точным. С точки зрения численного эксперимента моделирование поверхности не отличается от моделирования остовой структуры. Однако требования обратной связи с реальным экспериментом на уровне исследования колебательных спектров выдвигают задачу выбора экспериментального объекта, максимально приближенного к моделируемым кластерам. Именно поэтому для проверки результатов, полученных в ходе численного моделирования адсорбционных свойств поверхности никеля [19,99,100], кремнезема [32—35] и нитрида кремния [101] в качестве связующего экспериментального параметра, были использованы колебательные спектры соответствующих наноразмерных модификаций этих веществ.

При постановке задачи вычислительного моделирования большого кластера возникает качественно новая проблема выбора пути моделирования исходной структуры. Хорошо известно [102], что в большинстве случаев химические взаимодействия являются короткодействующими, в связи с чем структурные элементы, разделенные расстояниями, превышающими длины химических связей, практически не влияют друг на друга. Вследствие этого возникает опасность «не угадать» место и направление развития структуры. Положение часто усугубляется тем обстоятельством, что нежесткие структуры, к которым, в частности, относятся структуры кремнезема, характеризуются набором близко расположенных минимумов на поверхности полной энергии. Одним из выходов из этого положения является алгоритмичное моделирование. Суть этого подхода заключается в построении исходной структуры кластера с применением определенного алгоритма, основанного на «свидетельстве о происхождении» соответствующего продукта, содержащего набор отличительных признаков, свойственных только этому продукту [103]. Именно этот подход был использован при моделировании структур дисперсионных кремнезёмов [32—35]. Основу его составило алгоритмизированное представление о технологическом полиморфизме этих веществ.

7.1. Вычислительное моделирование аэросила. Вычислительное моделирование структуры и адсорбционных свойств аэросила [33] состояло из следующих этапов:

- 1) конструирование исходных структур многоатомных кластеров нанометрового размера;
- 2) вычислительное моделирование структуры сконструированных кластеров с помощью полуэмпирических квантово-химических методов;
- 3) вычислительное моделирование адсорбционных свойств исследованных кластеров по отношению к молекулам воды;
- 4) расчет дважды амплитудно-взвешенной плотности колебательных состояний кластеров и спектров неупругого рассеяния нейтронов с последующим сравнением рассчитанных и экспериментально измеренных спектров.

а) Исходные структурные модели. Приступая к конструированию исходных кластеров, полезно ввести понятия малого, среднего и большого кластеров, согласовав их с основными представлениями о кристаллохимических фрагментах и типом их упаковки в соответствии с принадлежностью изучаемой структуры к определенному структурному классу. Основным структурным фрагментом силикатов и кремнезёмов является кремний-кислородный тетраэдр $[\text{SiO}_4]$. Именно этот тетраэдр и рассматривается обычно при вычислительном моделировании кремнезёмных систем (см., например, [6,93,104,105]). Однако в свете многовариантности структур дисперсных кремнезёмов этот модельный кластер совершенно недостаточен для описания их свойств. Поэтому при вычислительном моделировании этого се-

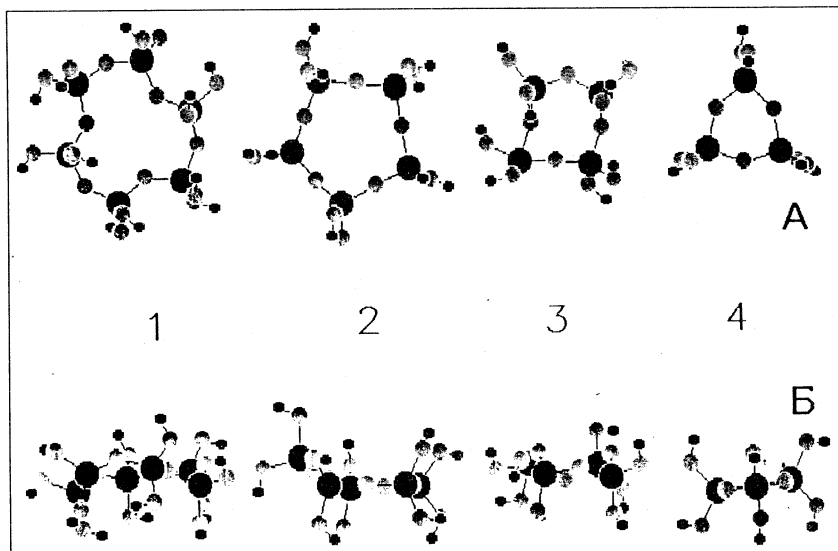


Рис.19. Малые циклы кремнекислородных тетраэдров $\text{Si}n\text{c}$ (AM1) [33]. Число n обозначает число атомов кремния в цикле: 1) $\text{Si}n3\text{c}$ (18); 2) $\text{Si}4\text{c}$ (24); 3) $\text{Si}5\text{c}$ (30); 4) $\text{Si}6\text{c}$ (36). В скобках указан метод расчета и приведены числа атомов в кластере. А и Б — две проекции (см. текст)

мейства веществ были сделаны специальные определения: введено понятие *малого кластера* как структурной модели периферийной (ниже поверхностной) функциональной группы; понятие *кластера средних размеров*, описывающего упаковку малых кластеров в соответствии с классификацией структуры и правильно передающего распределение атомов *ближнего порядка*; понятие *большого кластера*, в идеальном варианте предназначенного для отображения правильной объемной структуры вещества и распределения функциональных групп на его поверхности. Реальное содержание эти представления приобретают применительно к каждому изучаемому объекту.

Поскольку аэросил представляет собой аморфный тектокремнезем, то кластеры, моделирующие структуру его остова, должны иметь каркасную плотноупакованную структуру. Известно, что плотноупакованные кристаллические структуры кремнезема содержат циклы силоксановых цепочек с небольшим числом членов: четырехчленные циклы в кварце [106] и шестичленные в кристобалите [107] и тридимите [108].

Структурные модели индивидуальных малых циклов приведены на рис.19. Они получены в результате полной оптимизации по методу AM1

с помощью квантово-химических программ комплекса CLUSTER-Z1 [33]. Эти и все последующие расчеты произведены на персональных компьютерах типа РС АТ 386/387-33 и 486-66. Кластеры представлены в двух проекциях таким образом, что «вид сверху» (А) отвечает их максимальному размеру, а «вид сбоку» (Б) — минимальному.

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что, хотя лишь в кластере Si3 атомы кремния лежат строго в одной плоскости, и в остальных кластерах кремниевые циклы близки к плоским. В отличие от них большие циклы, с числом атомов кремния, большим 6, обладают явно выраженной неплоской структурой (см. рис.27 и п.7.2). Вследствие этого становится очевидным, что «фасетированные» грани объемной плотной структуры удобно строить лишь с помощью малых «жестких» циклов, представленных на рис.19. Структура, построенная с помощью больших циклов, неизбежно будет более рыхлой. Таким образом, моделью объемной структуры аэросила будут полиэдры, грани которых образованы малыми циклами.

При построении модельных структур предпочтение было отдано шестичленным циклам-гексагонам, вследствие того, что зародыши частиц аэросила образуются при высокой температуре, при которой более устойчива кристаллическая структура β -кristобалита [33].

Выбор гексагонного мотива позволил предложить достаточно простой алгоритм последовательного наращивания размера модельного кластера, который можно представить формулой

$$\text{Si}6c + 4n\text{Si} + 6m\text{Si}, \text{ где } n = 1, 2, 3 \text{ и } m = 1, 2, 3... \text{ при } n > 3.$$

Этот алгоритм соответствует такому развитию структуры кластера, когда добавление первых четырех атомов кремния к базовому гексагону Si6c сопровождается образованием трех новых гексагонов, являющихся граня-

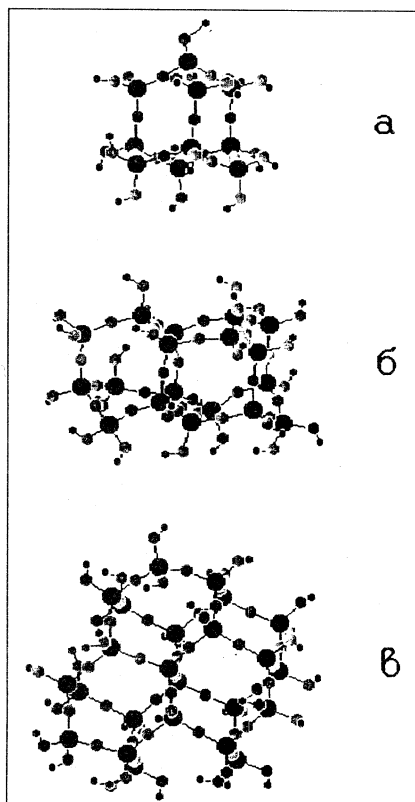


Рис.20. Кластеры плотноупакованной структуры (AM1) [33]: а) Si10 (54); б) Si18 (90); в) Si24 (118)

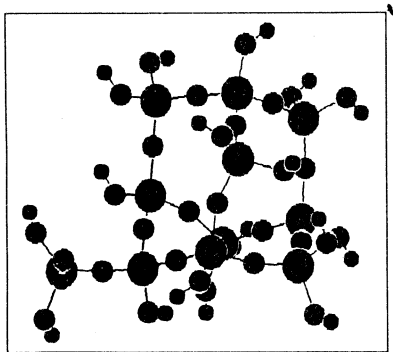


Рис.21. Кластер Si11 (60) (AM1), моделирующий силантриольную группу в плотноупакованной структуре [33]

ми замкнутой четырехгранной фигуры. Добавление каждой следующей группы из четырех атомов кремния приводит к образованию трех новых ребер, по которым происходит образование двух новых граней, так что четырехгранный кластер Si10 превращается в шестигранный кластер Si14, шестигранный кластер Si14 — в восьмигранный Si18 и т.д. Кластер при этом растет вширь. Для его развития вглубь, начиная с $n = 3$, структура может наращиваться добавлением шести атомов кремния. Совокупность кластеров Si10, Si18 и Si24, полученных в результате применения этого алгоритма, приведена на рис.20.

б) *Анализ модельных структур аэросила.* Если первый член этого ряда можно отнести к кластерам среднего размера, то два последних кластера относятся уже к классу больших. Анализ их структуры показывает, что выбранный алгоритм наращивания размера кластера не только передает объемную структуру вещества, но и позволяет выявить тенденцию распределения функциональных групп на его поверхности. В исследуемом объекте ими являются силанольные $(\text{OH})_1$ и силандиольные $(\text{OH})_2$ группы. По мере увеличения размера кластера силандиольные группы, монополюсно присутствующие в изолированных циклах (см. рис.19), постепенно замещаются силанольными и оттесняются на периферию. Как видно из рис.20, в замкнутых плотноупакованных структурах нет силантриольных групп. Эти группы возникают лишь при своеобразном ветвлении структуры, что показано на рис.21 на примере оптимизированной структуры кластера Si11. Основой для этого кластера была оптимизированная структура кластера Si10, представленная на рис.20.

В табл.5 приведены численные характеристики кластеров, показывающие динамику изменения соотношения числа силанольных и силандиольных групп в кластерах плотноупакованной структуры. Из таблицы видно, что в изолированных циклических кластерах $(\text{OH})_1$ групп совсем нет. Эти группы появляются лишь в компактно связанной структуре кластера Si10. При этом соотношение чисел $(\text{OH})_1$ и $(\text{OH})_2$ групп все еще остается в пользу силандиолов. Экспериментально хорошо известно, что в гидроксильной оболочке частицы аэросила может быть не более 20% силандиольных групп [5]. Таким образом, совершенно очевидно, что ни сами свободные циклы,

Таблица 5. Количественные характеристики модельных кластеров аэросила [33]

Кластер	Число атомов			Число групп		Линейный размер, А	
	полное	Si	O	(ОН) ₁	(ОН) ₂	миним.	максим.
Циклы							
Si3c	12	3	3	—	3	3,57	6,62
Si4c	16	4	4	—	4	3,62	8,11
Si5c	20	5	5	—	5	3,65	9,00
Si6c	24	6	6	—	6	3,62	8,72
Si8c	32	8	8	—	8	5,60	11,34
Si10c	40	10	10	—	10	5,18	13,07
Si14c	56	14	14	—	14	5,18	15,71
Объемные структуры							
Si10	54	10	12	4	6	8,57	11,16
Si14	72	14	18	8	6	9,00	14,30
Si18	90	18	24	10	7	10,52	15,41
Si24	118	24	36	15	7	10,52	16,02

ни компактные структуры из небольшого числа циклов не могут быть приемлемой моделью структуры частицы аэросила. По мере роста размера кластера соотношение гидроксильных групп меняется в пользу силанолов (см. кластер Si14 и далее) и имеет тенденцию к росту. Этот рост медленный, однако оценки показывают, что при выбранном алгоритме увеличения кластера при достижении им размеров, сопоставимых с экспериментальными значениями 100—200 Å, отношение чисел (ОН)₁ и (ОН)₂ групп может достигнуть 5—6 в пользу первых. При этом из анализа модельных структур видно, что силандиольные группы будут, в основном, существовать на вершинах концевых ребер, т.е. на нерегулярностях структуры поверхности реальной частицы. Выявленная тенденция в изменении структуры гидроксильной оболочки кластеров означает, что удельное содержание гидроксильных групп на поверхности аэросила должно изменяться антибатно величине его удельной поверхности (радиусу), что и было обнаружено экспериментально [109].

Предложенный алгоритм наращивания кластера, безусловно, не является единственным, он лишь соответствует наиболее вероятным структурам плотноупакованного аморфного кремнезема, отражая в полной мере четырехкратную координацию атомов кремния в плотной структуре, образованной гексагонами. По-видимому, свойственная аморфному состоянию нерегулярность структуры на макроскопических расстояниях обусловлена тем, что в плотной упаковке атомов соседствуют четырех-, пяти- и шестичленные циклы. Однако приведенные выше соображения о тенденции распределения

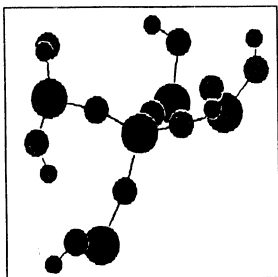


Рис.22. Фрагмент кластера Si18 (AM1), демонстрирующий чередующееся распределение «пустых» и связанных в силанольный центр поверхностных атомов кремния [33]

функциональных групп в реальной частице остаются справедливыми для циклов всех размеров.

Кластер Si18 с учетом вышесказанного может рассматриваться как достаточно реальная модель поверхности частицы аэросила. Это касается не только распределения гидроксильных групп, но и формирования установленной экспериментальной [5] чередующейся структуры атомов кремния, в которой атом кремния, несущий гидроксильную группу, соседствует с «пустым» атомом, не имеющим ненасыщенных связей в сторону от поверхности. На рис.22 приведен фрагмент кластера Si18, демонстрирующий сказанное. Центральный атом кремния в нем является «пустым».

На основании полученных результатов можно предложить следующие модели малого, среднего и большого кластеров модельных структур аэросила.

Основной функциональной группой на поверхности аэросила, как следует из структур кластеров Si18 и Si24, является изолированная силанольная группа. Вследствие этого простейшей моделью малого кластера может быть кремнекислородный тетраэдр, опирающийся на три атома кремния и содержащий одну группу OH. Взаимодействие этого кластера с водой рассматривалось в качестве основной модели в работах [15,92,93,100,110]. Полученные при этом результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными по колебательным спектрам воды, адсорбированной на поверхности частиц аэросила.

Аналогичный малый кластер с силандиольной группировкой может служить простейшей моделью изолированной силандиольной группы на поверхности аэросила. Как уже говорилось выше, эти группы располагаются на нерегулярностях структуры и их вклад в водный и гидроксильный компоненты аэросила сравнительно невелик. Силантриольные группы, как показано выше (см. рис.21), вообще чужды плотноупакованной структуре аэросила, и, являясь внешними, естественно, они крайне неустойчивы. В соответствии с этим их наличие на поверхности частиц аэросила вряд ли возможно.

Модельный кластер Si10 являет собой пример кластера средних размеров, воспроизводящего упаковку малых кластеров. Модельные кластеры Si18 и Si24 представляют собой большие кластеры, моделирующие не только объемную упаковку в ядре частицы аэросила, но и описывающие распределение гидроксильных групп на ее поверхности. По-видимому, дальнейшее наращивание размера кластера вряд ли целесообразно, поскольку получение качественно новой информации маловероятно вследствие малого радиуса действия сил химического взаимодействия. Приведенные выше структуры использованы для расчета колебательных спектров остова и гидроксильного компонента аэросила, а также спектров адсорбированной на них воды.

в) *Колебательные спектры остова и гидроксильного компонента.* На рис.23 представлены экспериментальный базисный спектр АВПС ядра аэросила совместно с двумя расчетными спектрами. Расчетные спектры были получены с помощью комплекса программ по вычислительной колебательной спектроскопии COSPECO [111]. Данные по силовому полю определены в процессе проведенного выше квантово-химического расчета в приближении AM1 расчетного комплекса CLUSTER-Z1. Первый из этих спектров (см. кривую 2) относится к кластеру Si18. Выше уже говорилось о том, что этот кластер представляет собой реалистичную модель большого кластера. Вместе с тем полученный для него расчетный спектр настолько сильно от-

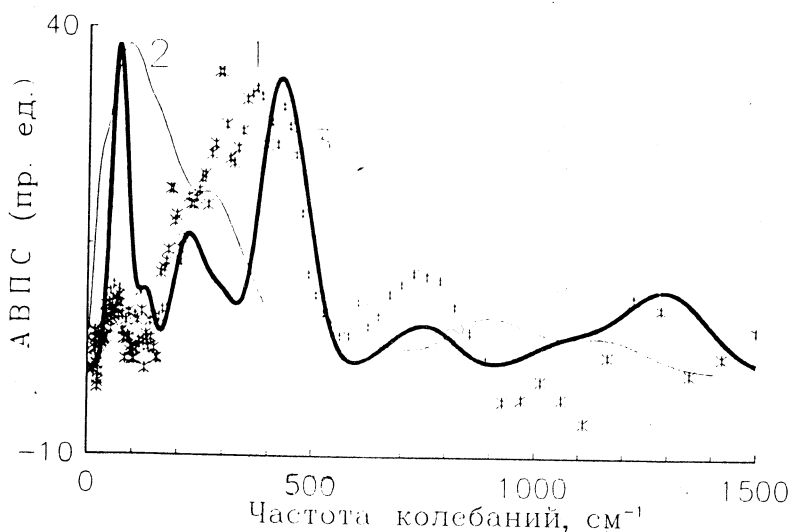


Рис.23. Колебательный спектр остова аэросила: 1) эксперимент, $T = 10\text{ K}$ [25]; 2) расчет для кластера Si18; 3) расчет для силоксановой цепочки Si10ch в циклических граничных условиях [103]

личается от экспериментального, что этот факт, на первый взгляд, кажется обескураживающим. Анализ причин наблюдаемого несоответствия позволил выявить совершенно новую проблему. Дело в том, что преобладающее большинство атомов кремния этого кластера при внимательном рассмотрении оказываются поверхностными, в связи с чем кинематическое поведение этих атомов существенно отличается от поведения внутренних при полном сохранении величин силовых постоянных для каждой выбранной пары атомов. Для устранения этого кинематического эффекта в рамках рассматриваемых кластеров необходимо увеличение размера кластера почти на порядок, что делает любой численный расчет совершенно нереалистичным. Возможен, однако, другой подход к решению этой проблемы. Рассматривая структуру плотноупакованных кластеров Si18 и Si24, можно заметить, что они состоят из набора цепочек Si-O-Si, расположенных наклонно к базисной плоскости* кластеров. Каждые три соседние цепочки в сечениях, параллельных этой плоскости, образуют типовую гексагонную структуру плотной упаковки. Таким образом, цепочка может рассматриваться как трансляционно-эквивалентная структурная единица, с помощью которой может быть воссоздана объемная структура аэросила. Результаты расчета колебательного спектра, представленные кривой 3 на рис.23, соответствуют цепочке, содержащей 10 атомов кремния при циклических граничных условиях. Силовые постоянные в этой цепочке получены перенесением данных расчета кластера Si18. Как видно из рисунка, расчетный и экспериментальный спектры хорошо согласуются друг с другом. Исключение составляет полоса при 80 см^{-1} . Эта полоса обусловлена несинфазным трансляционным движением кремний-кислородных тетраэдров. По мере увеличения длины цепочки она расщепляется на все большее число компонентов и ее максимум понижается, так что при числе атомов кремния в несколько десятков она, несомненно, примет вид, соответствующий эксперименту. Обращает на себя внимание полное соответствие положений максимумов всех полос в расчетном и экспериментальном спектрах. Это совпадение получено на основе выходных данных комплекса CLUSTER-Z1 без использования каких-либо корректирующих параметров.

На рис.24 приведены экспериментальный и расчетные спектры АВПС для гидроксильного покрова аэросила. Кривая 2 соответствует приведенному выше на рис.23 спектру для кластера Si18, который, как было сказано, представляет собой спектр колебаний поверхностных атомов. Кривая 3 представляет спектр колебаний атомов, связанных с десятью группами $(\text{OH})_1$, содержащихся в кластере Si18. Как было сказано в п.4.1, гидро-

*Введение термина «базисная плоскость» в этом случае условно. Под ним понимается сечение, выявляющее гексагонный орнамент структуры вещества.

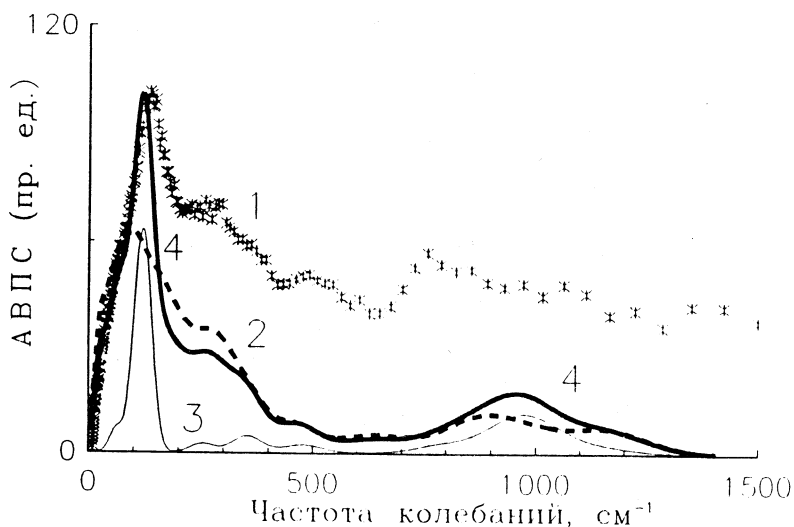


Рис.24. Колебательный спектр гидроксильного покрова аэросила: 1) эксперимент, $T = 10\text{ K}$ [25]; 2-4) расчет: 2) остов-поверхность кластера Si18 , 3) гидроксильный покров кластера Si18 , 4) сумма (2) и (3) [103]

ксильная компонента спектра АВПС аэросила должна состоять из спектра колебаний гидроксильных групп и спектра колебаний поверхностных атомов остова, сенсibilизированных этими гидроксильными группами в результате «эффекта всадника». Реальный спектр АВПС представляет собой совокупность этих спектров при правильном соотношении числа гидроксильных групп и поверхностных атомов кремния. Кривая 4 на рис.24 соответствует суммарному спектру с соотношением 1:1. Как видно из рисунка, этот спектр очень хорошо согласуется с экспериментальным.

Таким образом, предложенная модель плотноупакованной структуры аэросила [33] может считаться доказанной вследствие ее соответствия колебательным спектрам остова и гидроксильного покрова частицы аэросила.

г) *Композиционная структура и колебательный спектр адсорбированной воды.* Хорошая надежность результатов моделирования структуры частицы аэросила позволила рассмотреть более детально проблему адсорбции воды на ней [92]. Как было сказано выше, кластер Si10 относится к кластерам среднего размера, позволяющим воспроизвести реальное структурное соответствие изолированной функциональной группы и остова вещества. На рис.25 представлена полностью оптимизированная структура этого кластера, взаимодействующего с шестью молекулами воды. Этот результат полу-

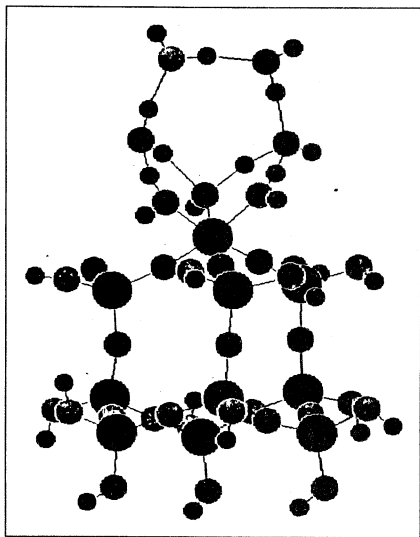


Рис.25. Кластер Si_{10}w_6 (72) с шестью молекулами воды (MNDO/H) [103]

чен в приближении MNDO/H программного комплекса CLUSTER-Z1 [97], поскольку необходимо было корректно учесть образующиеся водородные связи. Подробности моделирования взаимодействия воды с функциональными группами поверхности аэросила изложены в [92].

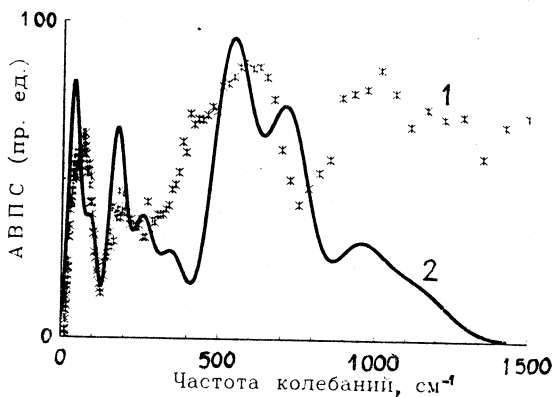
Молекулы воды адсорбируются на поверхности аэросила коллективным образом, что подтверждает вывод, сделанный в результате качественного анализа экспериментального спектра адсорбированной на аэросиле воды (см. п.5.3). При этом две первые молекулы координируются атомом кремния силанольной группы, насыщая его координационное число до шести. Остальные молекулы связываются с этими базовыми водородными связями. На рис.26 представлены экспериментальный и расчетный

спектр адсорбированной на аэросиле воды. Как и в предыдущих спектрах, расчетные спектры не подвергались дополнительной коррекции по частоте.

Как видно из рисунка, расчетный и измеренный спектры хорошо согласуются в главных чертах. Превышение интенсивности экспериментального спектра над расчетным в высокочастотной области может быть связано с фактом присутствия в экспериментальном спектре вклада двух- и более многофононных состояний. Недостаток интенсивности в низкочастотной области связан с тем обстоятельством, что состав адсорбционных водных комплексов на поверхности аэросила гетерогенен [92]. Помимо центров, содержащих шесть молекул, имеются центры с числом молекул от одной до пяти. Вопрос согласования расчетных и экспериментальных спектров, таким образом, включает проблему определения числа этих центров. Удовлетворительное согласие спектров, приведенных на рис.26, говорит о том, что в возможном многообразии адсорбционных комплексов центр с шестью молекулами воды вносит практически главный вклад.

В целом полученное хорошее согласие расчетных и экспериментальных базисных спектров компонентов аэросила с несомненностью свидетельствует о правомерности представленных на рис.20 моделей, описывающих плотноупакованную структуру аморфного кремнезема.

Рис.26. Колебательный спектр воды, адсорбированной на аэросиле: 1) эксперимент, $T = 10\text{ K}$ [25], 2) расчет для кластера Si10w6 [103]



7.2. Вычислительное моделирование силикагелей. Как хорошо известно из многочисленных данных [2] и как было показано ранее, силикагель относится к одному из наиболее непонятных веществ. Причина этого кроется в хорошо известной изменчивости его свойств. Это относится как к плохой воспроизводимости продукта уже на стадии его получения, так и к изменению его свойств и их чрезвычайной чувствительности к изменению внешних условий в процессе использования. Поэтому можно утверждать, что основным свойством силикагеля является «течение» его структуры, так что каждый образец силикагеля — это не одно и то же фиксированное структурное состояние аморфного кремнезема, но «мгновенный снимок» в цепи структурных превращений. На основании вышесказанного задача моделирования структуры силикагеля представляется достаточно непростой, поскольку неизвестно, какой именно «мгновенный снимок» реальной структуры следует воспроизвести. Поэтому, приступая к моделированию структурных кластеров силикагеля [34], авторы не ставили перед собой задачу воспроизведения определенной структурной конфигурации. Их целью было найти ответы на следующие основные вопросы, которые можно сегодня адресовать структуре силикагеля [28].

1. Как образуются поры силикагеля?
2. От чего зависит размер пор?
3. Почему колебательные спектры остова и гидроксильной оболочки силикагеля, как было показано экспериментально, зависят от размера пор?
4. Что собой представляют обнаруженные экспериментально адсорбированная и квазисвободная вода в порах?
5. Почему колебательный спектр адсорбированной воды не зависит от размера пор?

Как сказано в п.6.2, в основе структуры силикагеля-циклокремнезема лежат циклы цепочек кремнекислородных тетраэдров разного размера. Бы-

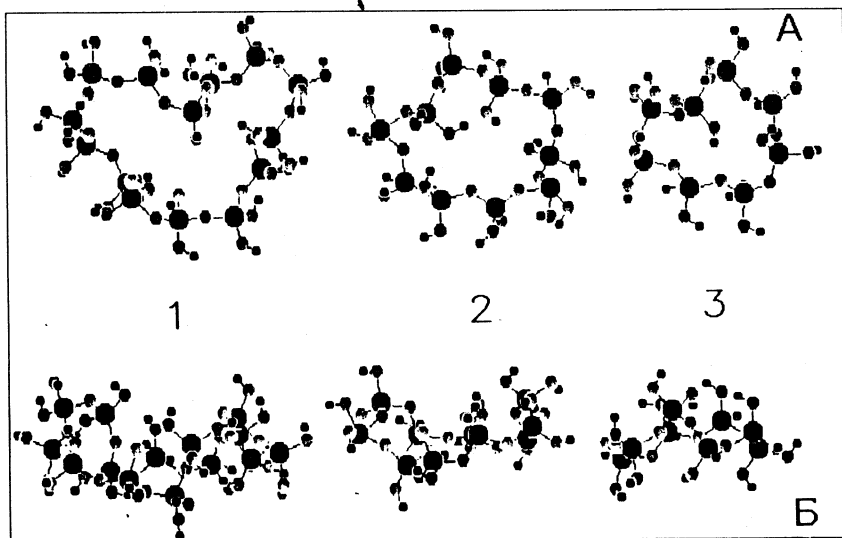


Рис.27. Большие циклы кремнекислородных тетраэдров *Sinc* (AM1) [34]: 1) Si₈ (48); 2) Si₁₀ (60); 3) Si₁₄ (84); А и Б — две проекции (см. текст)

ло отмечено, что рыхлая структура, характерная для силикагеля, может образовываться лишь циклами достаточно большого размера. На рис.27 показаны структурные модели нескольких больших циклов. Представленные структуры были первично построены и оптимизированы в рамках программы MM2 [112], а затем дополнительно оптимизированы по методу AM1 с помощью комплекса программ вычислительной химии CLUSTER-Z1 [97]. Каждый цикл представлен в двух проекциях таким образом, что «вид сверху» (А) отвечает их максимальному размеру, а «вид сбоку» (Б) — минимальному. Как видно из рисунка, по мере увеличения размера цикла его структура все более отклоняется от плоской. Одновременно с этим отчетливо наблюдается заметное стремление к «клеточному делению» цикла с образованием циклов меньшего размера.

Поскольку большие циклы неустойчивы и с термодинамической, и с микроскопической точек зрения, естественно предположить, что образование структуры силикагеля происходит путем соединения циклов разного размера друг с другом. Следует отметить, что циклы должны быть достаточно большими, так как конденсация циклов с числом атомов кремния, равным четырем, пяти, шести, приводит к образованию плотноупакованных структур типа аэросила или кварцевого стекла [33]. Несомненно, что эти небольшие циклы также участвуют в формировании структуры силикагеля, но они играют, скорее всего, лишь связующую роль.

Как видно из рис.27, большие циклы сильно искорежены, так что легко предвидеть, что при объединении, скажем, двух таких циклов они могут «схлопнуться». Однако, если вспомнить, что образование геля происходит в присутствии сольватированных ионов щелочного металла, то возникает естественное предположение, что главная роль ионов заключается в стабилизации такой структуры. На рис.28 представлена одна из возможных структур, образованная двумя циклами, содержащими 7 и 8 атомов кремния каждый и имеющими две общие силоксановые связи. В проекции, представленной на рисунке, хорошо видно, что эти циклы образуют «створки полураскрытой раковины».

Очевидно, что наличие сольватированного иона внутри этой структуры препятствует ее схлопыванию и способствует растяжению циклов. На основе этого был сделан естественный дальнейший шаг к предположению о том, что силикагель представляет собой твердый каркас, имеющий структуру, подобную ажурной сетке, обволакивающей плохо надутый футбольный мяч [34]. Ячейки этого каркаса, в отличие от футбольного мяча или правильных бакибольных структур типа C_{60} и C_{70} , представляют собой не идеальные гекса- и пентагоны, а являются неплоскими цепочечными циклами кремний-кислородных тетраэдров разного размера. Натянута структура во время синтеза обеспечивается сольватированными ионами (одним или несколькими), после удаления которых остаются поры разного размера.

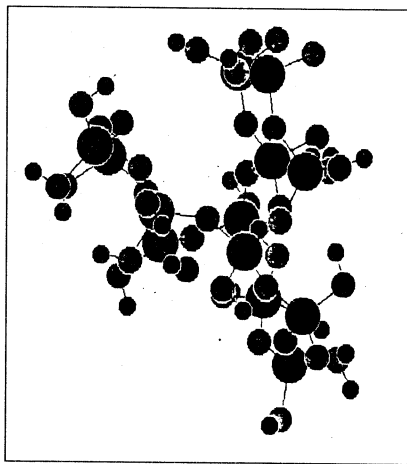


Рис.28. Кластер Si_{13dc} (75), состоящий из двух циклов Si_7c и Si_8c (MM2) [34]

Важно отметить, что образование циклов, их стыковка друг с другом и образование каркаса, ограничивающего пору, несомненно, являются статистическими процессами. Естественно, что они сильно подвержены влиянию внешних условий. Так, некоторые циклы при этом могут быть разомкнуты. Их число определяется, в частности, концентрацией кислоты. Этим, по-видимому, и объясняется затрудненность воспроизводимости структур силикагеля, упомянутая выше. В свою очередь, агрегирование таких элементарных каркасов по принципу плотной упаковки, применимому к сферическим или квазисферическим частицам, будет приводить к образованию глобулярной мезоструктуры, что и наблюдается экспериментально [2].

В соответствии с вышеизложенным иерархия кластеров, описывающих структуру силикагеля, представляется следующей. Малыми кластерами, моделирующими периферийные функциональные группы (в данном случае, гидроксильные группы), являются замкнутые и разомкнутые циклические структуры, содержащие 8 и более атомов кремния, а также места стыка двух циклов. Кластерами среднего размера, воспроизводящими упаковку малых кластеров и распределение атомов ближнего порядка, являются модельные структуры типа представленных на рис.27. Они могут различаться типом соединений, включающих один, два и более атомов кремния. В качестве кластеров, отображающих распределение атомов на больших расстояниях и распределение функциональных групп, следует рассматривать фрагмент поверхности каркаса, состоящий из двух-трех сочленений типа представленных на рис.27.

Предлагаемая концепция модели структуры силикагеля не противоречит известным макроскопическим свойствам этого вещества. Более того, она позволяет уже на качественном уровне объяснить ряд микроскопических свойств, не получивших объяснения до сих пор, в том числе колебательных спектров, представленных в п.4.2. Из приведенных моделей видно, что остов силикагеля представляет собой ажурную сетку, состоящую из цепочек силоксановых связей. Большая ширина размерного распределения циклов в этой структуре и ее лабильность очевидны, из чего следует, в частности, несомненная изменчивость распределения деформационных углов Si-O-Si от образца к образцу, с чем связаны основные изменения в наблюдаемых спектрах остова [26] (см. рис.11).

Гидроксильные компоненты силикагелей в соответствии с предлагаемой моделью структуры формируются набором трех кремний-гидроксильных групп, а именно силандиольными группами замкнутых циклов, силантриольными группами на концах разомкнутых циклов и силанольными группами в местах стыка циклов. Таким образом, гидроксильные компоненты силикагеля являются гетерогенными, а их колебательные спектры — составными. В связи с этим спектры будут зависеть от числа кремний-гидроксильных групп различного типа. В то же время очевидно, что соотношение чисел этих групп статистически распределено в достаточно большой области значений и может быть различным даже для разных фракций продуктов одного и того же технологического цикла. Авторы [34] полагают, что именно с этим обстоятельством связано различие наблюдаемых спектров колебаний гидроксильных компонентов силикагелей СГ100 и СГ20, представленных на рис.12.

Что касается спектра колебаний адсорбированной воды (см. рис.13,б), то его постоянство в условиях гетерогенности центров адсорбции и конкуренции между ними отражает тот факт, что в этой конкуренции в каждом образце побеждает один и тот же центр. Поскольку таким центром является

одна из трех возможных кремний-гидроксильных групп, то эта группа будет общей для всех образцов. В ближайшее время продолжающийся вычислительный процесс позволит выяснить, какая именно кремний-гидроксильная группа определяет адсорбцию в силикагеле. В отличие от аэросила, в структуре силикагелей как одинаковые, так и различные кремний-гидроксильные группы располагаются рядом, в связи с чем простейшие малые кластеры, представляющие изолированные группы в аэросиле, не могут рассматриваться как подходящие структурные модели. Именно поэтому в случае силикагеля в качестве малых кластеров следует рассматривать сами циклы или достаточно протяженные фрагменты циклов, а также места их соединения.

7.3. Вычислительное моделирование аэрогеля. Простейшей моделью структуры аэрогеля-поликремнезема является цепочка кремнекислородных тетраэдров [32]. В такой цепочке каждый атом кремния связан с двумя атомами кислорода силоксановой цепочки и с двумя гидроксильными группами. Таким образом, основной функциональной группой гидроксильного компонента аэрогеля, состоящего из изолированных цепочек, должна быть силандиольная группировка. Однако сравнительным анализом базисных колебательных спектров гидроксильных компонентов различных дисперсных кремнеземов (см. п.5.2) установлено, что основным элементом гидроксильного компонента аэрогеля является силанольная группа. Вследствие

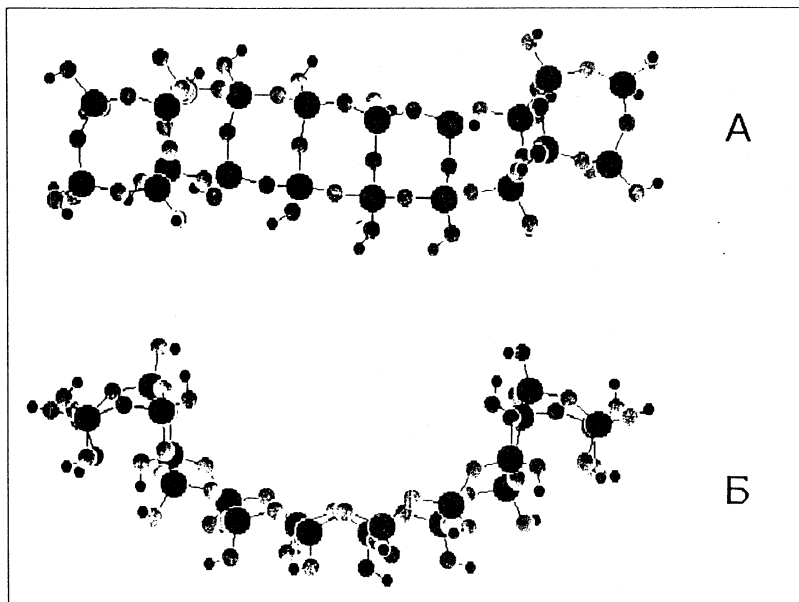


Рис.29. Ленточный кластер Si_{20b} (ММ2, 96) [35]: А) вид сверху; Б) вид сбоку

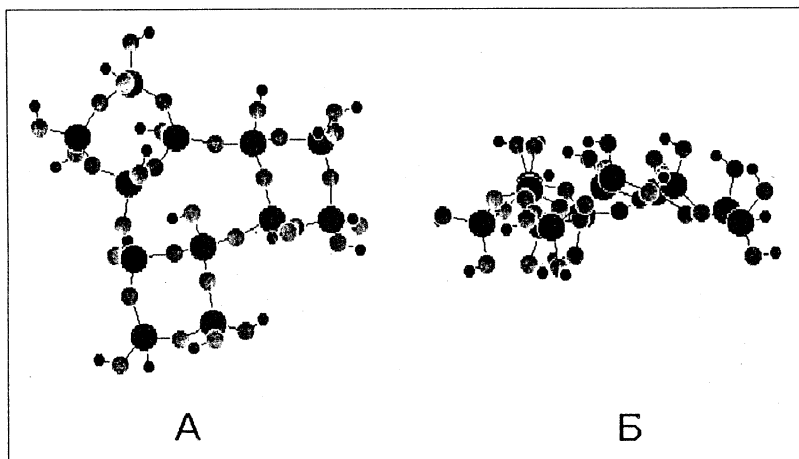


Рис.30. Кластер стыка лент Si_{12b} (MM2, 63) [35]: А) вид сверху, Б) вид сбоку

этого естественно предположить, что аэрогель представляет собой не монополикремнезем, образованный одиночными цепочками, но ди- или более сложный поликремнезем (см. классификацию в [94]), структурными фрагментами которого являются двойные или более сложные полосы-ленты. Ввиду большого объема капиллярных пустот макрообразца трудно предположить, что он состоит из многоцепочечных лент, так как при этом его плотность должна была бы быть достаточно высокой. Скорее всего, число цепочек в лентах вряд ли превышает 2—3. Одна из возможных структур такого рода приведена на рис.29. Структура имеет неплоскую форму. Следует при этом обратить внимание на квазирегулярную структуру ячеек в средней части. Основным размерным параметром модельного кластера является длина ленты и поэтому граница между кластером среднего размера и большим кластером достаточно условна. Особым местом структуры является стык нескольких лент. На рис.30 приведена одна из возможных моделей такого стыка, описываемая кластером среднего размера.

Основными функциональными группами на периферии ленты являются силанолы. Тем не менее из анализа модели структуры аэрогеля видно, что кластер, содержащий изолированную силанольную группу и оказавшийся хорошей моделью силанольных групп аэросила, не может моделировать функциональные группы аэрогеля. Первой причиной этого является то обстоятельство, что, в отличие от аэросила, силанольные группы в аэрогеле располагаются рядом, на расстоянии порядка $3,5 \text{ \AA}$, так что в процессе взаимодействия цепочки-ленты, например, с водой будут принимать участие не-

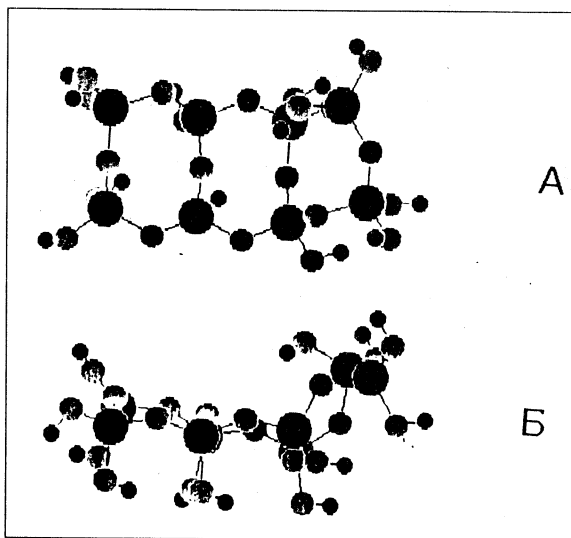


Рис.31. Малый кластер структуры аэрогеля Si8b (MM2, 42) [35]: А) вид сверху, Б) вид сбоку

сколько групп. Второй причиной является существенное отличие основной цепочечной структуры силоксановых связей аэрогеля от плотноупакованной структуры аэросила. Вследствие этого малый кластер, необходимый, по мнению авторов [35], для моделирования функциональных групп и рассмотрения взаимодействия аэрогеля с водой, должен иметь достаточно сложную структуру. Одна из возможных моделей такого кластера представлена на рис.31.

Представленные модельные структуры аэрогеля хорошо согласуются с бытующими представлениями о его структуре [3], детализируя их на атомном уровне. Вместе с тем они позволяют объяснить отличительную особенность колебательных спектров его компонентов — их узкополосность. Такой вид спектров, как известно, действительно характерен для полимеров [89], что еще раз подтверждает разумность представленной, по сути, полимерной модели этого кремнезема.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основное физико-химическое явление, рассмотренное выше, было названо технологическим полиморфизмом. И это словосочетание является не просто данью моде на новые термины, оно оказалось наполненным богатым

внутренним смыслом. Полиморфизм аморфных кремнезёмов надёжно установлен по их колебательным спектрам, являющимся «отпечатками пальцев» структуры вещества. Сам факт существования такого полиморфизма достаточно известен для лабильных систем. Можно было бы ограничиться этой ссылкой и попытаться качественно описать исследованные дисперсные аморфные кремнезёмы по степени их лабильности. Однако гораздо более продуктивным оказался путь, основанный на свойствах вещества, характерных только для него и позволяющих ввести характерный численный параметр (или параметры), с помощью которого была бы возможна классификация изучаемых веществ. Так, в случае аморфных веществ с молекулярной структурой успех в понимании полиморфных мод аморфного состояния был достигнут на пути рассмотрения этих мод как соответствующих мезофаз жидкокристаллического состояния [113]. Классификация аморфных фаз сразу же позволила обсуждать конкретные структурные модели вещества. В рассмотренном случае дисперсных кремнезёмов таким классификационным путеводителем оказалась технология изготовления продуктов, а классификационными параметрами — размерность и мультиплетность структур, образующихся при упаковке кремний-кислородных тетраэдров $[\text{SiO}_4]$. Установленные классификационные структурные моды позволили не только по-новому взглянуть на разных представителей этого вещества, но и предложить достаточно однозначный алгоритм моделирования соответствующих структур.

Другим указанием на плодотворность введенной терминологии является возможность ее обобщения на весь класс наноматериалов, к которым относятся и представленные выше кремнезёмы. Характерной чертой этих веществ является значительный вклад в их структуру поверхностей или границ раздела. Это же обстоятельство, в свою очередь, делает наноматериалы исключительно чувствительными к технологии изготовления и условиям содержания. Вследствие этого, как хорошо известно технологам, химическая формула вещества в действительности описывает семейство нанопроductов. С другой стороны, часто возникает ситуация, когда исследователь фундаментальных квантовых эффектов в наноматериалах чрезвычайно озабочен «грязью» на поверхности его образца. Однако эта «грязь» на поверхности и границах раздела наноматериалов жестко подчиняется законам химического взаимодействия и может быть идентифицирована или предсказана с помощью комплексного исследования того же технологического полиморфизма. Такой подход был успешно осуществлен, например, в случае семейства порошков нитрида кремния разного происхождения [101]. Особое внимание следует обратить на то обстоятельство, что в таком комплексном подходе квантово-химическое моделирование превращается в активное вычислительное атомоведение и приобретает значение анализирующего

инструмента. Это особенно важно в связи с грядущим наступлением эры нанотехнологии, переводящей привычный для нас мир вещей на уровень практического атомоведения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Айлер Р. — Химия кремнезема. М.: Мир, 1982.
- 1er R.K. — The Chemistry of Silica. Solubility. Polymerization. Colloid and Surface Properties and Biochemistry. New York: Wiley—Interscience, 1979.
2. Неймарк И.Е., Шейнфайн Р.Ю. — Силикагель: его получение, свойства и применение. Киев: Наукова думка, 1973.
3. Aerogels (Ed. J.Fricke). Springer, Heidelberg; Berlin; New York, 1986.
4. Модифицированные кремнеземы в сорбции, катализе и хроматографии (Под ред. Г.В.Лисичкина). М.: Химия, 1986.
5. Тертых В.А., Белякова Л.А. — Химические реакции с участием поверхности кремнезема. Киев: Наукова думка, 1991.
6. Чуйко А.А., Горлов Ю.И. — Химия поверхности кремнезема: строение поверхности, активные центры, механизмы сорбции. Киев: Наукова думка, 1992.
7. Литтл Л. — Инфракрасные спектры адсорбированных молекул. М.: Мир, 1969.
8. Hair M.L. — Infrared Spectroscopy in Surface Chemistry. New York: Dekker, 1967.
9. Лазарев А.Н. — Колебательные спектры и строение силикатов. Л.: Наука, 1968.
10. Davydov V.Ya., Kiselev A.V., Zhuravlev L.T. — Trans. Faraday Soc., 1964, vol.60, p.2254.
11. Киселев А.В., Лыгин В.И. — Инфракрасные спектры поверхностных соединений и адсорбированных веществ. М.: Наука, 1972.
12. Parfitt G.D., Sing K.S.W. — In Silicas (Ed. D.Barry). New York: Academic, 1976, p.143.
13. Лыгин В.И. — Журн. физ. химии, 1989, т.63, с.289.
14. Брей В.В. — В кн.: Химия, физика и технология поверхности. Киев: Наукова думка, 1993, с.75.
15. Khavryutchenko V., Natkaniec I., Sheka E. — In: VI-th International School on Neutron Physics, Alushta'90, JINR, Dubna, 1991, p.157.
16. Sheka E. — Physica B, 1991, vol.174, p.227.
17. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. — Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965.
18. Preuss E., Wuttig M., Sheka E. et al. — Journ. Electr. Spectr. Rel. Phenom., 1990, vol.54/55, p.425.
19. Заец В.А., Никитина Е.А., Хаврюченко В.Д. и др. — Поверхность. Физика. Химия. Механика, 1992, №9, с.33.
20. Sheka E., Natkaniec I., Khavryutchenko V. et al. — Journ. Electr. Spectr. Rel. Phenom., 1990, vol.54/55, p.855.
21. Sheka E., Khavryutchenko V., Natkaniec I. et al. — Physica B, 1991, vol.174, p.182.
22. Natkaniec I., Fricke J., Khavryutchenko V. et al. — Physica B, 1992, vol.180/181, p.522.

23. Шека Е.Ф., Хаврюченко В.Д., Натканец И. и др. — Журнал структ. химии, 1992, т.33, №4, с.66.
24. Шека Е.Ф., Хаврюченко В.Д., Натканец И. и др. — Журнал физ. химии, 1993, т.67, №1, с.38.
25. Маркичев И.В., Натканец И., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1993, т.34, №1, с.54.
26. Маркичев И.В., Натканец И., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1993, т.34, №1, с.64.
27. Маркичев И.В., Музыка А.Ю., Натканец И., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1993, т.34, №4, с.29.
28. Маркичев И.В., Натканец И., Хаврюченко В.Д., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1993, т.34, №4, с.39.
29. Sheka E.F., Natkaniec I., Markichev I. et al. — React. Kinet. Catal. Lett., 1993, vol.50, No.1/2, p.221.
30. Sheka E.F., Khavryutchenko V.D. — Phys. Low-Dim. Struct., 1994, vol.3, p.77.
31. Khavryutchenko V.D., Sheka E.F. — React. Kinet. Catal. Lett., 1993, vol.50, No.1/2, p.389.
32. Хаврюченко В.Д., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1994, т.35, №2, с.74.
33. Хаврюченко В.Д., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1994, т.35, №3, с.16.
34. Хаврюченко В.Д., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1994, т.35, №3, с.27.
35. Хаврюченко В.Д., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1994, т.35, №3, с.35.
36. Sheka E.F., Khavryutchenko V.D., Nikitina E.A. — Herald Rus. Ac. Techn. Sci., Part B, 1994, No.7, p.592.
37. Sheppard N. — Pure Appl. Chem., 1962, vol.4, p.71.
38. Morrow B.A., McFarlan A.J. — J. Phys. Chem., 1992, vol.96, p.1395.
39. Гавриленко В.И., Грехов А.М., Корбутяк Д.В., Литовченко В.Г. — Оптические свойства полупроводников. Киев: Наукова думка, 1987.
40. Severin J.M., Vankan J.M.J. — Philips Journal of Research, 1990, vol.45, p.35.
41. Киселев А.В., Лыгин В.И., Щепалин К.Л. — Журн. физ. химии, 1986, т.60, №7.
42. Лыгин В.И., Щепалин К.Л. — Журн. физ. химии, 1988, т.62, №8.
43. Gritsov A.G., Zhuravlev L.T., Gerasimova G.A., Khazin L.G. — J. Colloid Interface Sci., 1988, vol.126, №2.
44. Уиндзор К. — Рассеяние нейтронов от импульсных источников. М.: Энергоатомиздат, 1985.
45. Hall P.G., Pidduck A., Wright C.J. — J. Colloid Interface Sci., 1981, vol.79, p.339.
46. Boutin H., Prask H. — Surface Sci., 1964, vol.2, p.261.
47. White J.W. — Ber. Bunsenges Phys. Chem., 1971, vol.75, p.379.
48. Tempelhoff K., Feldman K. — Z. Phys. Chemie (Leipzig), 1975, vol.256, p.369.
49. Etzler F.M. — J. Colloid Interface Sci., 1983, vol.92, p.43.
50. Pidduck A. — Thesis. University of Exeter, 1980.
51. Hall P.G., Barraclough P.B. — J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1978, vol.74, p.1360.
52. Hall P.G., Rose M.A. — J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1978, vol.74, p.1221.
53. Steytler D.C., Dore J.C., Wright C.J. — Molecular Physics, 1983, vol.48, p.1031.
54. Steytler D.C., Dore J.C. — Molecular Physics, 1985, vol.56, p.1001.
55. Dunn M., Dore J.C. — J. Chystal Growth., 1988, vol.92, p.233.

56. Li J.-C., Bennington S.M., Benham M.J. et al. — Inst. Phys. Conf. Ser., 1987, No.101, p.109.
57. Li J.-C., Ross D.K., Howe L. et al. — Physica B, 1987, vol.156/157, p.376.
58. Mangel A., Maynard S., Clarke N.S. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A274.
59. Mitchell P.C.H., Tomkinson J. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A284.
60. Jacob K.H., Langel W. — In: Annual Report, RAL, 1990, p.A216.
61. Sundberg P., Tomkinson J. — In: Annual Report, RAL, 1990, p.A223.
62. Arai M., Taylor A.D., Hannon A.C., Bennington S.M. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A212.
63. Jobic H., Jacobs W. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A278.
64. Wright A.C., Guy C.A., Sinclair R.N., Hannon A.C. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A299.
65. Bellissent-Funel M.-C., Teixeira J., Bosio L. — J. Chem. Phys., 1987, vol.87, p.2231.
66. Kolesnikov A.I., Li J.-C., Ross D.K. et al. — Physics Letters A, 1992, vol.68, p.308.
67. Li J.-C. — In: Annual Report, RAL, 1991, p.A292.
68. Li J.-C., Londono D. — In: Annual Report, RAL, 1990, p.A167.
69. Li J.-C., Londono D. — In: Annual Report, RAL, 1990, p.A228.
70. Li J.-C., Londono D. — In: Annual Report, RAL, 1990, p.A229.
71. Andreani C. — J. Phys. C: Solid State Phys., 1983, vol.16, p.L513.
72. Andreani C., Bosi P., Sacchetti F., Loong C.K. — J. Chem. Phys., 1985, vol.83, p.750.
73. Li J.-C., Ross D.K., Howe L. et al. — Physica B, 1989, vol.156/157, p.376.
74. Prask H., Boutin H., Yip S. — J. Chem. Phys., 1968, vol.48, p.3367.
75. Burgman J.O., Sciesinski J., Sköld K. — Phys. Rev., 1968, vol.170, p.808.
76. Chen S.-H., Toukan K. — Phys. Rev. Lett., 1984, vol.53, p.1360.
77. Reichenauer G., Fricke J., Buchenau U. — Europhys. Lett., 1989, vol.8, p.415.
78. Kjems J.K., Freltoft T., Posselt D., Richter D. — In: Dynamics of Disordered Materials (Ed. D.Richter, A.J.Dianoux, W.Petry, J.Teixeira), Springer, Heidelberg; Berlin, New York. 1989, p.297.
79. Conrad H., Reichenauer G., Fricke J. — In: Dynamics of Disordered Materials (Ed. D.Richter, A.J.Dianoux, W.Petry, J.Teixeira). Springer, Heidelberg; Berlin, New York. 1989, p.304.
80. Conrad H., Buchenau U., Schätzler R. et al. — Physical Rev., 1990, vol.41B.
81. Vacher R., Woignier T., Pelous J. et al. — Europhys. Lett., 1989, vol.8, p.161.
82. Балукa Г., Белушкин А.В., Брагин С.И. и др. — Сообщение ОИЯИ, P13-84-242, Дубна, 1984.
83. Бохенков Э.Л., Натканец И., Шека Е.Ф. — ЖЭТФ, 1976, т.70, с.1027.
84. Колесников А.И., Бохенков Э.Л., Шека Е.Ф. — ЖЭТФ, 1983, т.84, с.2180.
85. Маркичев И.В., Натканец И., Шека Е.Ф. — Журнал структ. химии, 1993, т.34, №1, с.44.
86. Тейлор Дж. — Введение в теорию ошибок. М.: Мир, 1985.
87. Калиткин Н.Н. — Численные методы. М.: Наука, 1978.
88. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. — Численные методы. М.: Наука, 1987.
89. Грибов Л.А. — Теория инфракрасных спектров полимеров. М.: Наука, 1977.

90. Brinker C.J., Keefer K.D., Schaefer D.W., Ashley C.S. — J. Non-Cryst. Solids, 1982, vol.48, p.47.
91. Лазарев А.Н., Миргородский А.П., Смирнов М.Б. — Колебательные спектры и динамика ионно-ковалентных кристаллов. Л.: Наука, 1985.
92. Khavryutchenko V.D., Sheka E.F. — XIII European Chemistry at Interfaces Conferences. September 11—16, 1994, Kiev. Phys. Low-Dim. Struct., 1995, vol.4/5, p.99.
93. Горлов Ю.И., Заец В.А., Чуйко А.А. — Теор. эксп. химия, 1986, т.22, с.533.
94. Либау Ф. — Структурная химия силикатов. М.: Мир, 1988. (Liebau F. — Structural Chemistry of Silicates, Springer, Heidelberg; Berlin; New Work, 1985).
95. Морохов И.Д., Трусов Л.И., Чижик С.П. — Ультрадисперсные металлические среды. М.: Атомиздат, 1977.
96. Dewar M.J.S. — Theochem. Journ. Mol. Struct., 1989, vol.56, p.301.
97. Заец В.А. — Комплекс программ вычислительной химии CLUSTER-Z1. Институт химии поверхности НАН Украины, 1990.
98. Заец В.А. — Комплекс программ вычислительной химии CLUSTER-Z2. Институт химии поверхности НАН Украины, 1990.
99. Бесперстов Н.Н., Музычка А.Ю., Натканец И. и др. — ЖЭТФ, 1989, т.96, с.1752 (Soviet Physics — JETP, 1989, vol.69, p.989).
100. Sheka E., Nikitina E., Khavryutchenko V. et al. — Physica B, 1991, vol.174, p.187.
101. Markichev I., Sheka E., Goncharova N. et al. — Physica B, 1994, vol.198, p.200.
102. Борисов С., Балаганов Н., Губанов В. — Взаимодействие газов с поверхностью твердых веществ. М.: Наука, 1988.
103. Sheka E.F., Khavryutchenko V.D., Nikitina E.A. — Phys. Low-Dim. Struct., 1995, vol.1, p.1.
104. Ugliengo P., Saunders V., Garrone E. — J. Phys. Chem., 1990, vol.94, p.2260.
105. Лыгин В.И., Магомедбеков Х.Г. — Журн. структ. химии, 1985, т.26, с.28.
106. Wright A.F., Lehmann M.S. — J. Solid State Chem., 1981, vol.36, p.371.
107. Peacor D.R., Buerger M.J. — Amer. Miner., 1962, vol.47, p.539.
108. Kihara K. — Z. Kristallogr., 1978, vol.148, p.237.
109. Соболев В.А., Иванов В.С., Фурман В.И. — Укр. физ. журн., 1977, т.43, с.147.
110. Шека Е.Ф., Хаврюченко В.Д., Натканец И. и др. — Журн. структ. химии, 1992, т.33, №4, с.66.
111. Хаврюченко В.Д. — Комплекс программ вычислительной колебательной спектроскопии COSPECO, Институт химии поверхности НАН Украины, Киев, 1990.
112. Кларк Т. — Компьютерная химия, М.: Мир, 1990 (Clark T. — A Handbook of Computational Chemistry, Wiley, New York, 1985).
113. Шека Е.Ф. — Успехи физических наук, 1990, т.160, с.263.

РЕФЕРАТЫ СТАТЕЙ, ПОМЕЩЕННЫХ В ВЫПУСКЕ

УДК 539.142, 539.144.3

Изучение коллективных токов в ядрах. Михайлов И.Н., Бриансон Ш., Кантэн Ф. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1996, том.27, вып.2, с.303.

Описан поиск следов вихревого движения ядерной материи в данных о структуре ядра. Такое движение не влияет совсем или влияет слабо на изменение ядерной формы и объема. В обзоре дается классификация токов и их параметризация, удобная для изучения сферических и деформированных ядер. Делается обобщение концепции зависящего от времени «TAS»-преобразования координат элементов жидкости, предложенное последователями Римана в своих исследованиях токов в жидких телах эллиптической формы. Изучаются следы дипольного тороидального движения в данных об электромагнитных свойствах состояний ротационных полос, выстроенных над коллективными октупольными возбуждениями, и приводится пример, указывающий на важную роль такого движения. Анализируется предположение, согласно которому вихревая мода движения с постоянной по объему циркуляцией скорости может рассматриваться как независимая ветвь возбуждений. Это исследование позволяет интерпретировать $\Delta I = 4$ искажения спектра супердеформированных (с.д.) полос. Обсуждается альтернативный механизм генерации периодических искажений спектра ротационных полос: возникновение неаксиальной октупольной деформации, вызванное быстрым вращением. Отмечается аналогия между нашей интерпретацией необычных свойств с.д. состояний атомных ядер и недавними открытиями, сделанными с помощью квантовых приборов, изготовленных на базе современной технологии (сквидов). По аналогии обсуждаемые нами эффекты могут иметь место не только в атомных ядрах, но и в других мезоскопических системах.

Ил. 11. Библиогр.: 35.

УДК 539.14

Построение базисных функций ядерной модели двух ротаторов в пространстве Фока — Баргмана. Доценко И.С., Филиппов Г.Ф. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1996, том.27, вып.2, с.335.

На основе микроскопического подхода ядерная модель двух аксиальных ротаторов интерпретируется как обобщение модели $SU(3)$ Эллиота. Базис последней расширяется до базиса прямого произведения $SU(3) \times SU(3)$. В пространстве Фока — Баргмана выражения для оператора Казимира второго порядка группы $SU(3)$ и оператора Баргмана — Мошинского получены в явном виде. Волновые функции модели, также записанные в явном виде, характеризуются $SU(3)$ -симметрией нейтронных и протонных подсистем, $SU(3)$ -симметрией нейтрон-протонной системы (ядра) в целом, квантовыми числами момента L и его проекции M , а также собственным значением оператора Баргмана — Мошинского. В заключении отмечается возможность расширения области применимости полученного базиса.

Табл.8. Ил.1. Библиогр.: 15.

УДК 539.1.05

Кинематический анализ ядерных реакций с тяжелыми ионами с использованием твердотельных трековых детекторов. Годдшалк П.А., Фатер А., Брандт Р., Куреши И.Е., Кхан Х.А., Фидлер Г. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1996, том.27, вып.2, с.377.

Во взаимодействиях ускоренных тяжелых ионов с мишенями — тяжелыми ядрами в выходном канале были зарегистрированы многофрагментные события; наблюдаемое

число фрагментов варьировалось от 2 до 5. Тяжелые фрагменты регистрируются в твердотельных трековых детекторах ядер в виде протяженных узких треков, которые могут быть протравлены и затем измерены под микроскопом. Каждое ядерное взаимодействие может быть детально исследовано путем измерения геометрических параметров коррелированных треков. Основываясь на методе кинематического анализа, предложенного еще в 1979 г., можно детально определить параметры ядерного взаимодействия, такие как массы, энергии, углы вылета фрагментов и др. Этот метод впервые обеспечивает детальное исследование ядерных взаимодействий с тяжелыми ионами с испусканием нескольких фрагментов. Как было установлено, основная доля взаимодействий обусловлена каскадным делением ядер. Поперечные сечения ядерных реакций были измерены непосредственно, либо получены по данным упругого рассеяния с испусканием полуколичественной модели. Настоящая работа представляет обзор результатов исследований многофрагментных взаимодействий в реакциях с тяжелыми ионами и анализа этих взаимодействий методом кинематического анализа. Здесь представлены наиболее новые, а также неопубликованные результаты.

Табл.3. Ил.32. Библиогр.: 123.

УДК 530.1; 530.145; 537.61

Гамильтонов подход в теории конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией. *Исаев А.А., Ковалевский М.Ю., Пелетминский С.В.* Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1996, том.27, вып.2, с.431.

На основе гамильтонова формализма рассмотрена динамика конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией. Сформулирован метод получения скобок Пуассона динамических переменных, основанный на задании кинематической части лагранжиана и интерпретации внеинтегральных членов в вариации действия как генераторов канонических преобразований. Изучены дифференциальные законы сохранения, связанные с различными симметриями гамильтониана системы. Рассмотрены примеры канонических преобразований, играющих важную физическую роль, и получены их генераторы. Установлена связь гамильтонова и лагранжева подходов. В качестве конкретных физических объектов в обзоре изучена динамика жидких и квантовых кристаллов, многоподрешеточных магнетиков, сверхтекучих жидкостей (^4He , $^3\text{He-B}$), нематических эластомеров.

Библиогр.: 56.

УДК 541.41; 543.422; 546.294-31

Технологический полиморфизм дисперсных аморфных кремнеземов: неупругое рассеяние нейтронов на колеблющихся атомах и компьютерное моделирование.

Шека Е.Ф., Маркичев И.В., Натканец И., Хаврюченко В.Д. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1996, том.27, вып.2, с.493.

В обзоре систематизированы результаты подробного исследования колебательных спектров ряда промышленных аморфных высокодисперсных кремнеземов (аэросил, силикагель, аэрогель) с помощью неупругого рассеяния нейтронов. Обсуждаются обнаруженное явление технологического полиморфизма и результаты квантово-химического моделирования структур и колебательных спектров соответствующих полиморфных модификаций.

Табл.5. Ил.31. Библиогр.: 113.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Михайлов И.Н., Бриансон Ш., Кантэн Ф.</i> Изучение коллективных токов в ядрах	303
<i>Доценко И.С., Филиппов Г.Ф.</i> Построение базисных функций ядерной модели двух ротаторов в пространстве Фока — Баргмана	335
<i>Годдшалк П.А., Фатер А., Брандт Р., Куреши И.Е., Кхан Х.А., Фидлер Г.</i> Кинематический анализ ядерных реакций с тяжелыми ионами с использованием твердотельных трековых детекторов	377
<i>А.А.Исаев, М.Ю.Ковалевский, С.В.Пелетминский</i> Гамильтонов подход в теории конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией	431
<i>Шека Е.Ф., Маркичев И.В., Натканец И., Хаврюченко В.Д.</i> Технологический полиморфизм дисперсных аморфных кремнеземов: неупругое рассеяние нейтронов на колеблющихся атомах и компьютерное моделирование	493

CONTENTS

<i>Mikhailov I.N., Briançon Ch., Quentin P.</i> Studies of Collective Currents in Nuclei	303
<i>Dotsenko I.S., Filippov G.F.</i> Construction of the Basis Functions of the Two-Rotator Nuclear Model in the Fock-Bargmann Space	335
<i>Gottschalk P.A., Vater P., Brandt R., Qureshi I.E., Khan H.A., Fiedler G.</i> Kinematical Analysis of Heavy Ion Induced Nuclear Reactions Using Solid State Nuclear Track Detectors	377
<i>Isayev A.A., Kovalevsky M.Yu., Peletminsky S.V.</i> Hamiltonian Approach in the Theory of Condensed Media with Spontaneously Broken Symmetry	431
<i>Sheka E.F., Markichev I.V., Natkaniec I., Khavryuchenko V.D</i> Technological Polymorphism of Disperse Amorphous Silicas: Inelastic Neutron Scattering on Vibrating Atoms and Computational Modelling	493

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В журнале «Физика элементарных частиц и атомного ядра» (ЭЧАЯ) печатаются обзоры по актуальным проблемам теоретической и экспериментальной физики элементарных частиц и атомного ядра, проблемам создания новых ускорительных и экспериментальных установок, автоматизации обработки экспериментальных данных. Статьи печатаются на русском и английском языках. Редакция просит авторов при направлении статьи в печать руководствоваться изложенными ниже правилами.

1. Текст статьи должен быть напечатан на машинке через два интервала на одной стороне листа (обязательно представляется первый машинописный экземпляр). Поля с левой стороны должны быть не уже 3—4 см, рукописные вставки не допускаются. Экземпляр статьи должен включать аннотации и название на русском и английском языках, реферат на русском языке, УДК, сведения об авторах: фамилия и инициалы (на русском и английском языках), название института, адрес и телефон. Все страницы текста должны быть пронумерованы. Статья должна быть подписана всеми авторами. Текст статьи может быть напечатан на принтере с соблюдением тех же правил.

2. Формулы и обозначения должны быть вписаны крупно, четко, от руки темными чернилами (либо напечатаны на принтере и обязательно размечены). Желательно нумеровать только те формулы, на которые имеются ссылки в тексте. Номер формулы указывается справа в круглых скобках. Особое внимание следует обратить на аккуратное изображение индексов и показателей степеней: нижние индексы отмечаются знаком понижения $\subscript$, верхние — знаком повышения $\superscript$; штрихи необходимо четко отличать от единицы, а единицу — от запятой. Следует, по возможности, избегать громоздких обозначений и упрощать набор формул (например, применяя $\exp$, дробь через косую черту).

Во избежание недоразумений и ошибок следует делать ясное различие между прописными и строчными буквами, одинаковыми по начертанию (V и v, U и u, W и w, O и o, K и k, S и s, C и c, P и p, Z и z), прописные подчеркивают двумя чертами снизу, строчные — двумя чертами сверху ($\underline{\underline{S}}$ и $\overline{\overline{s}}$, $\underline{\underline{C}}$ и $\overline{\overline{c}}$). Необходимо делать четкое различие между буквами e, l, O (большой) и o (малой) и 0 (нулем), для чего буквы $\underline{\underline{O}}$ и $\overline{\overline{0}}$ отмечают двумя черточками, а ноль оставляют без подчеркивания. Греческие буквы подчеркивают красным карандашом, векторы — синим, либо знаком $\underline{\hspace{0.5em}}$ снизу чернилами. Не рекомендуется использовать для обозначения величин буквы готического, рукописного и других малоупотребимых в журнальных статьях шрифтов, однако если такую букву нельзя заменить буквой латинского или греческого алфавита, то ее размечают простым карандашом (обводят кружком). В случае, если написание может вызвать сомнение, необходимо на полях дать пояснение, например: ζ — «дзета», ξ — «кси», k — лат., k — русск.

3. Рисунки представляют на отдельных листах белой бумаги или кальки с указанием на обороте номера рисунка и названия статьи. Тоновые фотографии должны быть представлены в двух экземплярах, на обороте карандашом указать: «верх», «низ». Графики должны быть тщательно выполнены тушью или черными чернилами; не рекомендуется загромождать рисунок ненужными деталями: большинство надписей выносится в подпись, а на рисунке заменяется цифрами или буквами. Желательно, чтобы рисунки были готовы к прямому репродуцированию. Подписи к рисункам представляются на отдельных листах.

4. Таблицы должны быть напечатаны на отдельных листах, каждая таблица должна иметь заголовок. Следует указывать единицы измерения величин в таблицах.

5. Список литературы помещается в конце статьи. Ссылки в тексте даются с указанием номера ссылки на строке в квадратных скобках. В литературной ссылке должны быть указаны: для книг — фамилии авторов, инициалы, название книги, город, издательство (или организация),

год издания, том (часть, глава), цитируемая страница, если нужно; для статей — фамилии авторов, инициалы, название журнала, серия, год издания, том (номер, выпуск, если это необходимо), первая страница статьи. Если авторов более пяти, то указать только первые три фамилии.

Например:

1. Лезнов А.Н., Савельев М.В. — Групповые методы интегрирования нелинейных динамических систем. М.: Наука, 1985, с.208.
2. Годен М. — Волновая функция Бете: Пер. с франц. М.: Мир, 1987.
3. Turbiner A.V. — Comm.Math.Phys., 1988, vol.118, p.467.
4. Ушверидзе А.Г. — ЭЧАЯ, 1989, т.20, вып.5, с.1185.
5. Endo I., Kasai S., Harada M. et al. — Hiroshima Univ. Preprint, HUPD-8607, 1986.

6. Редакция посылает автору одну корректуру. Изменения и дополнения в тексте и рисунках не допускаются. Корректурa с подписью автора и датой ее подписания должна быть выслана в редакцию в минимальный срок.

Редакторы **Е.К.Аксенова, Э.В.Ивашкевич.**

Художественный редактор **А.Л.Вульфсон.**

Корректор **Т.Е.Попеко.**

Сдано в набор 1.12.95. Подписано в печать 28.02.95. Формат 60×90/16.

Бумага офсетная № 1. Печать офсетная. Усл.печ.л. 15,3. Уч.-изд.л. 18,38.

Тираж 500. Заказ 48916. Цена 4500 р.

141980 Дубна Московской области
ОИЯИ, Издательский отдел, тел. (09621) 65-165.

ISSN 0367—2026. Физика элементарных частиц и атомного ядра
1996. Том 27. Вып.2. 299—566.

Издательский отдел ОИЯИ готовит к выпуску книгу

Б. Н. Захарьев
УРОКИ КВАНТОВОЙ ИНТУИЦИИ

Из квантовой механики обычно знают лишь одну ее половину — прямую задачу. В данной книге иллюстрируются алгоритмы обратной задачи (желаемых изменений спектров и данных рассеяния). Показано, как деформировать потенциал, чтобы сдвинуть, породить или устранить произвольный уровень энергии, не трогая остальных, переместить локализацию отдельного состояния в пространстве, изменить скорость распада (ширину) квазистационарного состояния и даже «сгрести» функцию рассеяния в связанное состояние, погруженное в непрерывный спектр, и т.д. Показаны простейшие и универсальные «кирпичики» таких преобразований. Эта качественная теория квантового «управления» опирается на точные решения, которых теперь известно бесчисленное множество (часто полные наборы), и обобщается на волны на решетках и в периодическом поле (экзотика управления спектральными зонами) и на многоканальные системы. При минимальных усилиях читатель обретает интуицию, предсказательная сила которой (без формул и компьютеров) выходит за рамки точных моделей. Благодаря доступности изложения и новизне материала книга будет полезна как студентам и аспирантам, так и специалистам.

Дубна, ОИЯИ, 1996, 300 с., илл.

Для приобретения книги обращаться по адресу:

**141980 Дубна, Московская обл.,
ул. Жолио-Кюри, 6, ОИЯИ,
Издательский отдел
E-mail: publish@pds.jinr.dubna.su**