

Балтийский государственный технический университет «Военмех» им. Д. Ф. Устинова

УДК 530.16+536-34.3:[535.2/.4+535.521.3]+536.7+536.8

ББК 22.317

Редакция от 13.06.2004 была депонирована в ВИНТИ: 16.07.2004 , № 1249 - В2004

В. В. Савуков

**Уточнение аксиоматических принципов статистической физики
(теоретическое обоснование поискового проекта “Euler”)**

Copyright © 1986 – 2006. The project “Euler” by Vladimir V. Savukov. Настоящие материалы являются объектом авторского права, регламентируемого международным законодательством и законом РФ "Об авторском праве и смежных правах" от 19 июля 1995 года, № 110 - ФЗ.



31.07.2006


Санкт-Петербург, 2006 г.

РЕФЕРАТ

УДК 530.16+536-34.3:[535.2/.4+535.521.3]+536.7+536.8

Уточнение аксиоматических принципов статистической физики / Савуков В. В.;

Б ГТУ «Военмех» им. Д. Ф. Устинова – СПб, 2004. – 178 с.: ил. – Библиогр.: 54 назв. – Рус. –

Редакция от 13.06.2004 была депонирована в ВИНТИ: 16.07.2004, № 1249 - В2004

Монография посвящена исследованию границ применимости аксиоматических принципов, лежащих в основе статистической физики. Автором был выполнен гармонический анализ свойств обобщённой функции, описывающей индикатрису кнудсеновского (ламбертовского) рассеяния диффузного газа квантовых частиц на некоторой поверхности. На основании полученных результатов высказано теоретическое предположение о непрерывном существовании замкнутых физических систем, для которых состояние *детального* статистического равновесия не является единственно возможным стационарным макросостоянием, наиболее вероятным для заданных условий. В такого рода системах могут существовать состояния *глобального* статистического равновесия, характеризующиеся пространственно анизотропными макроскопическими параметрами. Данные состояния должны быть типичны для твёрдотельной электроники, квантовой оптики и молекулярной динамики, когда имеет место упругое волновое рассеяние (дифракция) газа квантовых частиц (электронов проводимости, фотонов электромагнитного излучения или молекул газа) на границах заполняемого ими объёма.

Причиной таких эффектов является то, что в рассматриваемых ситуациях главная гипотеза статистической физики о "равновероятности пребывания замкнутых систем во всех доступных им микросостояниях" входит в противоречие с СРТ-теоремой Паули-Людерса. Данная гипотеза должна быть определённым образом уточнена, в результате чего ныне существующая аксиоматика статистической физики превращается в весьма распространённый, но не единственно возможный частный случай. Из этого уточнения следует, что описание равновесных макросостояний изучаемых систем не может быть корректно осуществлено в границах применимости имеющегося аппарата статистической физики, ключевые понятия которой (определение вероятности макроскопического состояния, определение среднего значения физической величины на основе микроканонической гипотезы, и т. д.) – базируются на указанном априорном предположении.

Для аксиоматически независимого анализа изучаемых систем выполнено численное моделирование, имитирующее динамику движения единичной «пробной частицы». Этот метод, который был здесь реализован для рассмотрения процессов переноса электронов проводимости в ограниченных полупроводниках, в отличие от имеющегося аппарата статистической физики не использовал каких-либо априорных предположений, постулатов и гипотез относительно того, *как именно* должно выглядеть наиболее вероятное стационарное макросостояние рассматриваемых систем. Макроскопические же характеристики моделируемых систем формировались за счёт естественного усреднения параметров движения пробной частицы *по времени*, а не в результате *фазового* усреднения, применимого лишь в случае справедливости микроканонической гипотезы.

В ходе выполнения автором указанных имитационных экспериментов было получено подтверждение ранее сделанных им теоретических выводов о характере реализации наиболее вероятных стационарных макросостояний в изучаемых системах, а также было предсказано существование некоторых неизвестных в настоящий момент термомангнитных эффектов. Если в дальнейшем натурный физический эксперимент подтвердит реальность существования указанных эффектов, то они могут быть использованы для создания новых теплоэнергетических устройств с особыми полезными свойствами.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|------------|
| Введение | 4 |
| 1. Аксиоматические принципы статистической физики | 9 |
| Неравновесные процессы | 9 |
| Равновесные системы | 12 |
| <i>Краткое обобщение содержания главы № 1</i> | 17 |
| 2. Анализ выполнимости аксиоматических принципов | 18 |
| Аксиоматические принципы и детальное равновесие | 18 |
| Условие корректности аксиоматики статистической физики | 22 |
| Вероятность исхода индуцированного события квантового перехода | 25 |
| Вероятность индукции события квантового перехода | 31 |
| Иллюстративное пояснение к законам Кнудсена и Ламберта | 35 |
| Выполнимость законов Кнудсена и Ламберта в квантовых системах..... | 41 |
| Математический анализ физической корректности закона Кнудсена | 56 |
| <i>Краткое обобщение содержания главы № 2</i> | 61 |
| 3. О практической реализации исследуемых процессов | 64 |
| Значение изознергетических процессов для реальных систем | 64 |
| Теплоэнергетические устройства с дискретным циклом | 70 |
| Энтропия реальных физических систем..... | 78 |
| Второй закон термодинамики..... | 84 |
| Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом | 85 |
| О предпосылках, лежащих в основе текущего направления работ | 97 |
| <i>Краткое обобщение содержания главы № 3</i> | 101 |
| 4. Имитационное моделирование исследуемых процессов | 102 |
| Назначение имитационной модели | 102 |
| Общие принципы построения имитационной модели | 103 |
| Результаты имитационных экспериментов | 106 |
| Комментарий к результатам имитационных экспериментов | 117 |
| <i>Краткое обобщение содержания главы № 4</i> | 122 |
| Заключение | 123 |
| Список использованных источников | 124 |
| Приложение П1: Математические свойства закона Кнудсена | 127 |
| Приложение П2: Физические эксперименты (фотометрия) | 161 |
| Приложение П3: Рецензия на депонирование (БГТУ, Петербург) | 177 |
| Приложение П4: Рецензия политехнич. университета (СПбГПУ) | 178 |



Введение

Как известно, одна из основных целей всякой точной естественной науки (например, какой-либо области физики) заключается в обобщении ранее накопленного эмпирического (экспериментального) опыта. Обобщения такого рода, обычно выраженные в форме математических зависимостей, позволяют прогнозировать поведение тех или иных объектов, являющихся предметом рассмотрения соответствующей науки. Таким образом, указанные математические зависимости представляют собой, в конечном счете, не что иное, как уравнения эмпирической регрессии, более или менее удачно аппроксимирующие реальные характеристики изучаемых природных явлений.

Однако, для построения весьма сложных математических моделей, выходящих за границы примитивного эмпиризма, оказывается недостаточно исключительно только лишь результатов регрессионного анализа экспериментальных данных. Часто при глубоком и детальном описании исследуемых объектов возникает необходимость в привлечении некоторых дополнительных основополагающих понятий (основных принципов). Корректность использования данных понятий не может быть доказана в рамках базирующейся на них научной дисциплины. Поэтому соответствующие принципы имеют характер неких правдоподобных гипотез, априорно постулируемых как самоочевидные. Указанные постулаты составляют аксиоматику основанной на них науки.

Из вышесказанного следует, что достоверность результатов моделирования тех или иных реальных явлений определяется как качеством аппроксимации в рамках построения соответствующих «уравнений эмпирической регрессии», так и обоснованностью применения найденных зависимостей для изучения конкретной предметной области. Качество аппроксимации зависит от объёма ранее накопленного эмпирического материала и от возможностей метода регрессионного анализа, привлечённого для его обработки. Обоснованность же применения полученных математических зависимостей характеризуется корректностью использования аксиоматики научного аппарата для моделирования вполне определённого явления природы.

Значение корректности аксиоматики обуславливается тем, что сам по себе объём имеющихся экспериментальных данных ещё не определяет границы применимости полученных на их базе математических моделей: не важно, насколько достоверно то или иное регрессионное приближение, найденное для какой-то ранее исследованной предметной области, если явление, подлежащее рассмотрению в настоящий момент, этой области заведомо не принадлежит. Таким образом, имеющийся опыт создания научных теорий гласит: сколь угодно большое количество эмпирической информации не гарантирует перехода в методологическое качество основанных на них выводов.

Одним из весьма наглядных примеров для иллюстрации ограниченного характера применимости базовых постулатов тех или иных научных дисциплин может служить триумфальная (в течение двух веков) история развития классической механики, опирающаяся на весьма разумные и наглядные предположения Ньютона о свойствах пространства и времени. Однако, как и всякая физическая теория, ньютоновская физика оказалась адекватна действительности лишь в рамках применимости её базовых гипотез. Дальнейшее появление релятивистской физики (опыт Майкельсона) и квантовой механики («ультрафиолетовая катастрофа») явилось очередным подтверждением этого обстоятельства: ни одна теория не может претендовать на роль абсолютной истины, даже если она отлично согласуется с большей частью известных эмпирических данных.

В качестве другого примера такого рода можно привести гипотезу о принципиальной неделимости атомов, основанную на колоссальном опыте человечества в соответствующей предметной области¹. Данный опыт обобщал эмпирические знания, накопленные в течение более чем трёх тысяч лет. Все многовековые попытки алхимиков осуществить так называемую «трансмутацию» (превращение одних химических элементов в другие²) потерпели полную неудачу, так как эти попытки предпринимались с помощью *химических* реакций, т. е. в рамках применимости атомистического учения. Более того, очевидная бесплодность затраченных усилий надолго дискредитировала даже саму мысль о реальности достижения указанной цели. Лишь открытие так называемых *ядерных* реакций позволило, наконец, осуществить то, что считалось невозможным на протяжении нескольких десятков веков.

Всё вышеизложенное в настоящей главе носит вполне тривиальный и общеизвестный характер. Однако практика показывает, что людям свойственно абсолютизировать имеющийся у них опыт. Например, в утверждении Альберта Эйнштейна:

“Теория оказывается тем более впечатляющей, чем проще её предпосылки, чем значительнее разнообразие охватываемых ею явлений и чем шире область её применимости. Именно поэтому классическая термодинамика произвела на меня очень глубокое впечатление. Это единственная общая физическая теория, и я убеждён, что в рамках применимости своих основных положений она никогда не будет опровергнута” (1949 г.)

большинство читающих его склонно обращать почти всё своё внимание на слова «никогда не будет опровергнута». Напротив же текст «в рамках применимости своих основных положений» — игнорируется практически полностью.

В связи с таким субъективным характером восприятия научных знаний здесь было решено особо акцентировать внимание на следующем важном обстоятельстве: выводы любой научной дисциплины, даже если они пафосно декларируются как некие «фундаментальные законы природы», не висят сами по себе в воздухе, подобно улыбке Чеширского Кота. В основе указанных выводов всегда лежит совершенно определённая аксиоматика и вполне конечный (хотя, возможно, и довольно большой) объём эмпирической информации. Данные обстоятельства *принципиально ограничивают* пределы применимости результатов того или иного научного анализа. Сам факт наличия такого рода ограничений является неотъемлемым свойством научной методологии познания.

В настоящей работе предпринята попытка уточнения границ применимости тех аксиоматических принципов, на базе которых выстроен формализм статистической физики. Полученные выводы, разумеется, имеют отношение и к границам корректного применения термодинамики³.

¹ *Атомистика* — учение о дискретном строении материи из неделимых частиц.

² Основная цель, как известно, состояла в том, чтобы превратить «неблагородные» металлы (ртуть, свинец) — в золото.

³ Термодинамику в определённом смысле (предметная область изучаемых явлений) можно считать упрощённым феноменологическим аналогом статистической физики, хотя хронологически термодинамика появилась раньше, чем статистическая физика.

Проблема обоснованности применения данной аксиоматики в тех или иных конкретных случаях представляет собой принципиально важный вопрос и является предметом самого пристального рассмотрения и многочисленных дискуссий с момента возникновения статистической физики (середина девятнадцатого века) до наших дней.

Интерес к вышеуказанной проблеме обусловлен следующими двумя причинами:

1. Аксиоматика статистической физики действительно до сих пор не свободна от существенных противоречий, которые во многих случаях носят качественный характер. Большинство этих противоречий связано с предпринятыми попытками обоснования необратимости реальных физических процессов, апостериорного доказательства H -теоремы Больцмана (статистического аналога второго закона термодинамики) и т. д. Типичное отношение к современному состоянию данного вопроса¹ отражено, например, в высказывании известного японского теоретика Риого Кубо, который в своей книге “Статистическая механика” [27, стр. 191-192] пишет:

“Обоснование статистической механики. Физика занимает ведущее место среди точных наук, а статистическая механика является одним из главных её разделов. Если теперь мы скажем, что в обосновании статистической механики имеется много неясностей, то это может вызвать удивление и недоумение читателя. Работая сам в этой области, автор настоящей книги чувствует некоторую неловкость, но положение действительно таково”.

2. Очевидно бесспорное наличие в природе таких макроскопических явлений², сам факт существования которых находится в явном противоречии, например, с уже упоминавшейся H -теоремой Больцмана. Конечно же, речь идёт о наблюдаемом астрономами характере динамических процессов в галактических и метagalacticких масштабах. Практически в каждом учебнике физики можно обнаружить главу, посвящённую критике теории тепловой смерти Вселенной. Сама эта критика варьируется в диапазоне от декларативного утверждения о не замкнутости Вселенной как физической системы (к такого рода объектам H -теорема Больцмана не применима), до изошёренных попыток как-то объяснить реально наблюдаемые явления в рамках законов статистической физики и термодинамики: в данном направлении пройден весьма длинный путь — от простой флуктуационной гипотезы Больцмана (более века назад), до самых утончённых современных моделей Вселенной. Ниже дана характерная цитата из учебника “Термодинамика и статистическая физика” [38]:

“Всемирно-историческим результатом работы термодинамиков второй половины девятнадцатого века явилось открытие Второго Закона Термодинамики³, формулировка условий равновесия и устойчивости изолированной термодинамической системы.

¹ Более подробно информация, связанная с обоснованием аксиоматики статистической физики, изложена в соответствующей главе настоящей работы. Здесь же пока лишь просто констатируется сам факт наличия указанной проблемы.

² Имеются в виду макроявления, не сводящиеся к статистическим флуктуациям.

³ Напоминаем, что данный закон — это феноменологический (т. е. основанный исключительно только на обобщении имеющегося опыта) аналог H -теоремы Больцмана в статистической физике.

... Важнейшие результаты в разработке и формулировке Второго Закона Термодинамики принадлежат Клаузиусу. В 1865 году он распространил Второй Закон Термодинамики – закон возрастания энтропии – на Вселенную, написав, что «Энергия мира постоянна. Энтропия мира стремится к максимуму».

... Необоснованно расширяя Второй Закон Термодинамики и применяя его ко Вселенной, Клаузиус сделал неправильные философские выводы. Это послужило основой теории тепловой смерти Вселенной. Клаузиус и Томсон утверждали, что по мере достижения теплового равновесия во Вселенной наступит тепловая смерть, прекратятся все самопроизвольные процессы и Вселенная застынет среди безжизненного покоя.

... Больцман, опирающийся на вероятностно - статистические представления, боролся с теорией тепловой смерти Вселенной. Он выдвинул возражение против неё, состоящее в том, что хотя Вселенная близка к состоянию равновесия, в её отдельных участках существуют огромные флуктуации, размеры которых велики по сравнению с размерами окружающего человека и наблюдаемого им мира и несопоставимо продолжительны по сравнению с длительностью его жизни. Но вместе с тем эти флуктуационные образования являются бесконечно малыми величинами по сравнению с бесконечно большой и вечно существующей Вселенной.

... Однако эти выводы нельзя признать правильными, поскольку представления о вероятности столь больших флуктуаций во Вселенной с точки зрения окружающего нас мира эквивалентны представлению о невероятности.

... Наблюдающиеся в видимой части Вселенной новые образования звёзд ... с точки зрения гипотезы Больцмана являются крайне маловероятными.

В настоящее время для разъяснения сложившегося противоречия выдвигаются различные точки зрения.

... Не вдаваясь, однако, в детальное рассмотрение разногласий по этому вопросу, ограничимся следующими замечаниями. Прежде всего, существующие в настоящее время опытные данные свидетельствуют о том, что теория тепловой смерти Вселенной неверна; весь человеческий опыт подтверждает, что в окружающем нас мире идёт непрерывное развитие, и нет никаких оснований и даже намёков считать, что процессы протекают с затуханием в направлении прекращения.

Наука свидетельствует о непрерывном круговороте и движении материи, о развитии и смене форм движения, о непрерывном превращении одних форм материи в другие, о их неограниченном разнообразии. Заслугой астрономов и астрофизиков является доказательство того, что во Вселенной происходят непрерывные сложные, многообразные взаимосвязи между звёздами и межзвёздным веществом, приводящие к непрерывно происходящему возникновению, развитию и гибели звёздных образований, галактик, миров” [38, стр. 102-107].

Таким образом, применительно к H -теореме Больцмана нет возможности провести, например, аналогию с теоремой Ферма: мол, строгое доказательство пока не найдено, однако же, никаких исключений из рассматриваемых правил нет. Такая ситуация дала бы основание предположить¹, что появление указанного доказательства является лишь вопросом времени. Напротив, данные астрофизических наблюдений скорее говорят о том, что в масштабе Вселенной исключением, видимо, следует считать те ситуации, когда обсуждаемые выводы статистической физики всё-таки выполняются.

Здесь, к сожалению, невозможен сколько-нибудь подробный обзор трудов по затронутой интересной тематике. Поэтому ограничимся лишь констатацией того очевидного факта, что мы живём в мире, основная часть которого, видимо, устроена гораздо сложнее, чем это можно себе вообразить исходя из нынешних модельных представлений статистической физики и термодинамики. Автором сделано теоретически обоснованное предположение о том, что и в масштабах, менее грандиозных, чем вселенские, существуют некоторые виды физических систем, адекватное описание которых нельзя осуществить в границах применимости аксиоматики вышеуказанных научных дисциплин. Настоящая работа [54] посвящена начальному этапу исследования данных систем, выполняемому в рамках поискового проекта "Euler".



¹ Именно, только *предположить*, — вспомним учение о неделимости атома, находившее подтверждение своей правоты на протяжении целых тридцати двух веков.

1. Аксиоматические принципы статистической физики

Существуют две области статистической физики, каждая из которых использует собственную аксиоматику: это теории *неравновесных* процессов и *равновесных* систем.

Неравновесные процессы

Аксиоматика теории неравновесных процессов содержит ряд тождественных по своему значению формулировок различных постулатов, среди которых одна из наиболее известных — это так называемая *гипотеза молекулярного хаоса* (Stoßzahlansatz). Данная гипотеза была выдвинута Л. Больцманом в качестве возражения И. Лошмидту (*парадокс обратимости* – Umkehrreinward, 1876 г.) и Э. Цермело (*парадокс возврата*, основанный на теореме возврата Пуанкаре – Wiederkehrreinwand, 1896 г.), которые подвергли критике корректность *H*-теоремы, введённой Больцманом в аппарат статистической физики в качестве функционального аналога второго закона термодинамики.

Подробный анализ аксиоматики теории неравновесных процессов не является предметом настоящей работы. Однако стоит заметить, что гипотеза молекулярного хаоса, как, в прочем, и эргодическая гипотеза того же Больцмана, противоречат теории множеств. В классической молекулярно-кинетической теории (в отличие от квантовой) динамика частиц строго детерминирована. Жёсткий лапласов формализм описания физической системы принципиально исключает возможность наличия какого-либо «люфта» в параметрах движения частиц, который мог бы проявляться (и накапливаться) в результате, например, столкновения этих частиц между собой. Данные выводы не зависят от числа частиц в системе и от времени наблюдения за ней. Какой-либо индетерминизм при релаксации импульса и (или) энергии частиц в результате отдельных актов рассеяния — отсутствует по определению, т. е. является множеством меры нуль. Сумма же любого числа нулей всегда останется нулём, поскольку «нельзя из ничего получить что-то». Таким образом, состояние классической системы всегда строго определено. Это абсолютно исключает необратимую потерю информации о первоначально заданном состоянии системы по истечении некоторого конечного (даже очень большого) промежутка времени, что как раз и предполагается гипотезой молекулярного хаоса.

В связи с вышеизложенным весьма нелогично выглядят до сих пор широко распространённые рассуждения следующего вида [02, стр. 389-391]:

"Поскольку сейчас имеется неоспоримое доказательство, как закона возрастания энтропии, так и атомистической структуры материи, необходимо признать, что состояние тела, полученное из его естественного состояния посредством обращения скоростей всех его молекул на противоположно направленные, в высшей степени невероятно и практически никогда в природе не реализуется¹.

¹ Это утверждение звучит очень странно. На мой взгляд, два состояния *классической* (не квантовой) системы, отличающиеся друг от друга только знаком импульсов частиц, должны иметь принципиально одинаковую вероятность своей реализации. Каждое из описанных состояний ничуть не лучше и не хуже другого. Какая-либо искусственная селекция этих состояний на «естественные» и «невероятные» имеет целью лишь «подгонку» поведения описываемой физической системы под заранее декларируемый результат, априорно считающийся единственно возможным – В. С.

Для того чтобы сделать более наглядным утверждение о малой вероятности состояния системы с обращёнными скоростями молекул, обратимся к примеру, рассмотренному в конце § 1¹. Если обратить скорость частицы, влетевшей в большой сосуд **A** и испытавшей в нём малое число столкновений, на противоположную, то частица через короткий промежуток времени влетит обратно в малый сосуд **B**. Однако достаточно изменить направление обращённой скорости на малую величину² (при этом состояние частицы кажется столь же «вероятным»), для того, чтобы частица оставалась в большем сосуде **A** практически «навсегда».

Разумеется, можно было бы попробовать найти логическое обоснование гипотезы молекулярного хаоса, выйдя за пределы именно *классического* детерминизма. Ранее упоминавшийся «люфт» в параметрах движения частиц мог бы, например, появиться как следствие индетерминированной по своему характеру редукции пакета вероятностей [11, стр. 164], имеющей место при релаксации импульсов *квантовых* частиц в процессе их изоэнергетического волнового рассеяния (дифракции) друг на друге или на каких-либо иных препятствиях. Однако такой подход требует признания того, что фазовая траектория каждой квантовой частицы³ не является непрерывной на уровне подпространства импульсов. Более того, эта траектория не может быть даже описана разрывной функциональной зависимостью, подчиняющейся условиям Дирихле: если интерпретировать каждый акт рассеяния квантовой частицы как разрыв первого рода в подпространстве импульсов её фазового μ -пространства, то, например, однозначно определённое⁴ чистому состоянию частицы до рассеяния будет соответствовать некое вероятностное множество состояний после рассеяния. Причём, согласно воззрениям копенгагенской школы, принципиально не могут существовать какие-либо "скрытые параметры", способные исключить указанную неоднозначность траекторной функции.

¹ В данном примере рассматривается замкнутая система, состоящая из двух разновеликих по объёму сосудов, – большого сосуда *A* и малого сосуда *B*. Внутри системы находится некая частица идеального газа. Сосуды соединены между собой тонкой полый трубкой, по которой частица может переходить из одного сосуда в другой.

² Да с какой собственно стати?! Как говорят в таких случаях шахматисты – «тогда это была бы другая партия». «Чуть-чуть изменённой» величине обращённой скорости соответствует также «чуть-чуть изменённая» величина скорости прямой. При учёте этого обстоятельства частица опять-таки легко и просто вернётся из большого сосуда в малый. А мы неминуемо *обязаны* учесть указанное обстоятельство, поскольку оно лежит в основе строго детерминистического формализма Лапласа, на котором базируются все модельные построения классической статистической физики – В. С.

³ Применительно к квантовым частицам понятие фазовой траектории может быть сохранено путём его переопределения на основании теоремы Эренфеста, описывающей динамику центра тяжести нормированного к единице объёма «жидкости вероятности» с плотностью $\rho = |\Psi|^2$ [11, стр. 54-59]. При этом обычно говорят не столько о *линии* фазовой траектории, сколько о *траекторной трубке*, ширина которой зависит от вероятностной «размытости» соответствующих сопряжённых параметров частицы.

⁴ Разумеется, значения каких-либо конкретных параметров этого «чистого состояния» могут быть известны лишь с точностью до неопределённостей Гейзенберга.

В свою очередь, описанная способность квантовых частиц «исчезать» и «появляться» в различных частях доступного им фазового пространства принципиально не исключает возможности существования в этом пространстве *источников* и *стоков* фазовых траекторий, имеющих не одинаковую плотность в одних и тех же локальных участках фазового объёма. Таким образом, вообще говоря, не запрещено наличие не равной нулю дивергенции потока фазовых траекторий в некоторых частях фазового пространства системы.

Существование подобных источников и стоков в фазовом пространстве допускается даже в рамках классических модельных представлений. Речь идёт о так называемом «приближении мгновенных столкновений» [34, стр. 321-322, 336]:

“Допустим, что газ настолько разрежён, что длина свободного пробега молекулы λ много больше радиуса действия межмолекулярных сил r_0 и соответственно время свободного пробега τ много больше времени взаимодействия двух молекул τ_0 ... В этом случае можно ввести понятие «столкновения» молекул, понимая под этим процесс изменения движения каждой из молекул, происходящий за то время, которое одна из молекул проводит в сфере действия второй. Мы можем в силу неравенства $\tau \gg \tau_0$ считать процесс столкновения мгновенным. Так как скорости молекул конечны, то изменение координат молекул за время столкновения $\Delta x_i = v_i \cdot \tau_0$ может считаться равным нулю, но изменение проекций скорости или импульса молекул $\Delta v_i = w_i \cdot \tau_0$ и $\Delta p_i = F_i \cdot \tau_0$ имеет конечное значение (мы должны считать, что при $\tau_0 \rightarrow 0$ ускорение w_i и сила взаимодействия молекул F_i неограниченно возрастают, так что произведения $w_i \cdot \tau_0$ и $F_i \cdot \tau_0$ стремятся к конечному пределу). Таким образом, в этом приближении столкновение сопровождается лишь скачкообразным изменением импульса обеих молекул. ... В момент столкновений фазовая изображающая точка молекулы в μ -пространстве скачком переходит из одного положения в другое (благодаря скачкообразному изменению импульса), и в силу этого уравнение непрерывности для функции распределения в μ -пространстве в принятом приближении не справедливо. Это значит, что в μ -пространстве существуют источники и стоки функции распределения, мощность которых определяется столкновениями между молекулами.

... столкновения между молекулами газа приводят к скачкообразному изменению проекций скорости (при неизменных координатах) и, следовательно, к скачкообразному перемещению изображающих точек в μ -пространстве. В этом приближении изображающие точки «гибнут» в одних частях μ -пространства и «рождаются» в других, не пересекая границ выделенного в μ -пространстве объёма. Это означает, что приближение «мгновенных» столкновений вынуждает нас ввести ... источники и стоки молекул данной скорости в данной точке пространства”.

Между тем очень важно заметить, что в случае *квантовых* систем речь идёт о *реальных* источниках и стоках, поскольку здесь частицы в процессе переходов между

микросостояниями действительно «исчезают» и «появляются» в различных областях фазового пространства без пересечения границ данных областей: при индетерминированной релаксации импульсов частиц во время указанных переходов – принципиально не существуют какие-либо промежуточные значения фазовых координат этих частиц¹.

Несколько забежав вперёд, заметим, что применительно к теории равновесных систем данное обстоятельство делает заведомо некорректным использование теоремы Лиувилля и следующей из неё микроканонической гипотезы [02, стр. 23, 40-45], [27, стр. 14, 104-105]. Введение же «квантовых аналогов» теоремы Лиувилля², обусловленное её формальным сходством с уравнением Шредингера [28, стр. 65], никак не меняет общей ситуации. Например, исходя из обратимого во времени и причинного уравнения Шредингера, с помощью теории возмущений Паули вывел своё уравнение (так называемое "Master equation"), описывающее стохастические, необратимые процессы [30, стр. 407-410]. Однако этот вывод основан на *гипотезе о случайности фаз* волновых функций системы в любой момент времени. Следовательно, опять-таки возникает вопрос о характере стохастического распределения указанных фаз, а значит, неизбежен и произвол при выборе функций, описывающих плотность вероятности этих фаз для заданных условий. Для соблюдения принципа равновероятности пребывания замкнутой квантовой системы во всех доступных ей областях фазового пространства необходимо осуществить надлежащую «подгонку» под требуемый ответ, назначив «волевым порядком» соответствующую по виду функцию плотности вероятности.

Равновесные системы

Статистическая физика равновесных систем базируется на гипотезе о равновероятности всех микросостояний, доступных данной системе. При этом имеется в виду следующее:

1. Наиболее вероятное стационарное³ состояние замкнутой физической системы называется *равновесным* состоянием. Равновесное состояние является макроскопическим. Оно представляет собой совокупность всех⁴ доступных системе микросостояний, т. е. таких конкретных состояний, каждое из которых может быть осуществлено при заданном уровне энергии.
2. В каждый фиксированный момент времени равновесное состояние реализуется через одно из составляющих его микросостояний. При этом *система с одинаковой вероятностью может быть обнаружена в любом из микросостояний, образующих её равновесное макросостояние*.

Определение равновесного состояния замкнутой физической системы, приведённое в пункте 1, не содержит каких-либо предположений о том, *как именно* должно

¹ Своего рода «нуль-транспортировка» из фантастических романов.

² Уравнению Лиувилля, описывающему сохранение фазового объёма в классической теории, соответствует уравнение Шредингера для унитарного оператора, описывающего временную эволюцию квантовой системы.

³ Состояние системы, при котором её наблюдаемые макроскопические свойства не зависят явно от времени (так называемая стационарность *в узком смысле*).

⁴ В *классической* физике число возможных микросостояний замкнутой системы, вообще говоря, не ограничено. Но для *квантовой* системы это число всегда конечно.

выглядеть указанное состояние. Данное определение всего лишь утверждает, что равновесное состояние замкнутой системы — это такое её состояние, в котором рассматриваемую систему можно обнаружить с наибольшей вероятностью. Дефиниция такого рода, конечно же, не вызывает никаких возражений.

Изложенный в пункте 2 постулат о равновероятности всех доступных микросостояний, образующих равновесное макросостояние замкнутой физической системы, носит характер априорно (без каких-либо логических доказательств) декларируемой правдоподобной гипотезы. На данной аксиоматике базируется весь существующий аппарат статистической физики, используемый для описания свойств равновесных систем. Ниже приведена типичная формулировка указанного постулата [23, стр. 31]:

“Основное предположение статистической термодинамики¹ формулируется следующим образом: *замкнутая система может находиться с равной вероятностью в любом допустимом стационарном квантовом состоянии*. Это предположение используется, например, ... при определении вероятности состояния, среднего значения физической величины. Оно применяется также при рассмотрении того, что происходит при установлении контакта между двумя системами.

.....

Замкнутая система определяется как система с постоянной энергией, постоянным числом частиц и постоянным объёмом².

.....

Состояние считается допустимым, если оно совместимо с характеристиками системы. Это означает, что энергия такого состояния должна лежать в пределах возможного изменения энергии системы, а число частиц в данном состоянии должно равняться числу частиц, характеризующему систему”.

Гипотеза о равновероятности всех доступных состояний играет исключительно большую роль в статистической теории равновесных систем. Введение данной аксиоматики позволяет декларировать то, *как именно* должно выглядеть равновесное состояние замкнутой системы, а также даёт основания для введения в аппарат статистической физики понятия о микроканоническом распределении³ [02, стр. 40-45]:

¹ Здесь, разумеется, речь идёт о *статистической физике*. Однако используемое цитируемым автором не совсем точное наименование научной дисциплины ещё раз подчёркивает тесную связь между статистической физикой и термодинамикой – В. С.

² На мой взгляд, эта формулировка не очень хороша, поскольку она не исключает, например, возможности стационарного энергообмена (или даже стационарного массообмена) рассматриваемой системы с окружающей средой – В. С.

³ Микроканоническая гипотеза позволяет при вычислении макроскопических параметров системы заменять чрезвычайно трудоёмкую операцию усреднения каких-либо характеристик *по времени* (усреднение такого рода требуется самим определением данных параметров, — [02, стр. 39], [28, стр. 336-342] и др.) на гораздо более простую операцию *фазового* усреднения. Однако указанная замена имеет смысл только лишь в случае заведомой справедливости использованной аксиоматики.

“Мы введём для замкнутой системы, находящейся в состоянии статистического равновесия, функцию распределения $\rho(q, p)$ постулативно, обосновывая наш выбор тем, что все полученные из неё результаты блестяще совпадают с опытом¹. Причём это совпадение имеет место не только для вычисляемых средних значений величин, но и для малых отклонений от средних, наблюдаемых в системах (флуктуаций).

Такой подход является принятым и в других разделах теоретической физики. Уравнения классической механики Ньютона или уравнения электромагнитного поля Максвелла не выводятся из более простых принципов, а постулируются как законы природы, справедливость которых подтверждается огромным числом полученных из них следствий.

Введём постулативно для замкнутой системы, находящейся в статистическом равновесии, так называемое *микрочаноническое распределение*, для которого плотность ρ постоянна вдоль гиперповерхности постоянной энергии $H(q, p) = \mathcal{E} \dots$

Микрочаноническому распределению соответствует гипотеза о равновероятности равновеликих областей фазового пространства, доступных системе, т. е. предположение, что вероятность некоторого состояния пропорциональна соответствующему объёму фазового пространства.

.....

Микрочаноническое распределение может быть наглядно сопоставлено с теоремой Лиувилля. В самом деле, пусть некоторому начальному состоянию системы соответствует объём фазового пространства $\Delta\Gamma$, конечному состоянию – $\Delta\Gamma'$. По теореме Лиувилля $\Delta\Gamma = \Delta\Gamma'$, но тогда, как следует из микрочанонического распределения, вероятности обоих состояний одинаковы. Таким образом, мы приходим к правильному выводу, что механически детерминированному (т. е. с вероятностью, равной единице) переходу системы из начального состояния в конечное соответствует одинаковая вероятность обоих состояний.

Было бы неправильно думать, что такие рассуждения доказывают справедливость микрочанонического распределения, так как в общем случае мы не знаем, как фазовая траектория системы проходит в доступной ей области фазового пространства.

Вообще, введение некоторых априорных вероятностей в статистическую физику является, по-видимому, необходимым для статистического рассмотрения вопроса. С этой точки зрения попытки обоснования статистического распределения $\rho(q, p)$ на основе детерминированного поведения механических систем вообще представляются необоснованными”.

¹ В области применимости классической статистики, основанной на классической механике – примечание автора цитируемой книги.

Как уже говорилось ранее, принцип равновероятности доступных микросостояний вводится в статистической физике *априорно* (постулативно), т. е. подобно некоей аксиоме, не требующей каких-либо логических доказательств. Некорректность такого подхода к столь фундаментальному вопросу — очевидна.

Наряду с этим имеются попытки и *апостериорного*¹ подхода к провозглашению аксиоматических принципов статистической физики. Такие попытки известны столько же времени, сколько существует указанная аксиоматика. В данной связи чаще всего упоминается так называемая эргодическая² гипотеза и соответствующие теоремы³:

- Эргодическая гипотеза (см. [02, стр. 39-45], [08, стр. 66], [19, стр. 72], [26, стр. 168-170], [27, стр. 19-20, 104-105]);
- Квазиэргодическая теорема (см. [02, стр. 40-45], [27, стр. 104-105]);
- Средняя эргодическая теорема (см. [28, стр. 336-342]).

Эргодическая гипотеза была выдвинута Людвигом Больцманом для обоснования выбора микроканонического распределения как средства для замены трудоёмкого усреднения по времени более простым фазовым усреднением. Согласно эргодической гипотезе существует только *одна* замкнутая фазовая траектория⁴ на поверхности постоянной энергии. Это следует из того, что фазовая траектория должна проходить через *все* точки энергетической поверхности, причём через каждую точку может проходить только одна фазовая траектория. Поэтому фазовые точки изоэнергетического ансамбля должны быть расположены вдоль общей фазовой траектории.

В дальнейшем посредством использования теории множеств было доказано, что эргодическая гипотеза неправильна (А. Розенталь, М. Планчерель, 1913 г.). Поэтому П. и Т. Эренфесты в своём известном обзоре по статистической механике («Enzyklopädie der mathematischen Wissenschaften», 1912, Bd. IV, Art. 32) выдвинули менее жёсткую *квазиэргодическую гипотезу*, согласно которой траектория системы через достаточно большой промежуток времени проходит сколь угодно близко к любой точке изоэнергетической поверхности, выделенной в фазовом пространстве. Доказано, что квазиэргодическая гипотеза справедлива для широкого класса механических систем. Однако она не имеет отношения даже к классической (не говоря уже о квантовой) статистической физике, так как время, в течение которого фазовая точка системы проходит вблизи всех точек поверхности постоянной энергии, столь велико, что не имеет никакого отношения ко времени релаксации реальной физической системы⁵ [02, стр. 40-45].

¹ *Апостериорный* — происходящий из принципов, основанных на обобщении фактов.

² От греческого *εργον* – работа и *οδος* – путь.

³ Известно также множество иных предполагаемых вариантов решения данной проблемы, но пока не один из них не получил заметного признания (см., например, [26]).

⁴ Необходимость наличия лишь одной единственной замкнутой фазовой траектории противоречит описанной ранее возможности существования как разрывов отдельных траекторий, так и ненулевой дивергенции в фазовом пространстве *квантовых* систем. Это вполне объяснимо, так как Больцман сформулировал свою гипотезу ещё в девятнадцатом веке, т. е., разумеется, в рамках *классических* представлений о динамике.

⁵ На такой же точке зрения стоят Р. Толмен («The principles of Statistical Mechanics», Oxford, 1938, p. 69) и Р. Фаулер («Statistical Mechanics», Cambridge, 1936, § 1.4).

В 1931 г. фон Нейман доказал так называемую *среднюю эргодическую теорему*, которая была в том же году уточнена Биркгофом. Не вдаваясь в подробности, заметим, что эта теорема, в свою очередь, подразумевает наличие специальных свойств у преобразований Гамильтона: гамильтониан должен порождать метрически транзитивные преобразования. Если бы наличие таких свойств было доказано, содержание и выводы средней эргодической теоремы стали бы предметными. В этом направлении было выдвинуто *предположение* (Окстоби, Улем (1941)), согласно которому почти всякая группа непрерывных преобразований является метрически транзитивной. С другой стороны, Кац (1959) *доказал*, что фактически невозможно установить, порождает ли гамильтониан метрически транзитивные преобразования. Таким образом, и данный вариант «эргодического» подхода к проблеме апостериорного обоснования постулатов статистической физики так и не достиг цели, заявленной её авторами [28, стр. 336-342].

То место, которое занимает эргодическая гипотеза и соответствующие теоремы в аксиоматике ныне существующего аппарата статистической физики, может быть графически проиллюстрировано следующим образом [28, стр. 336]:

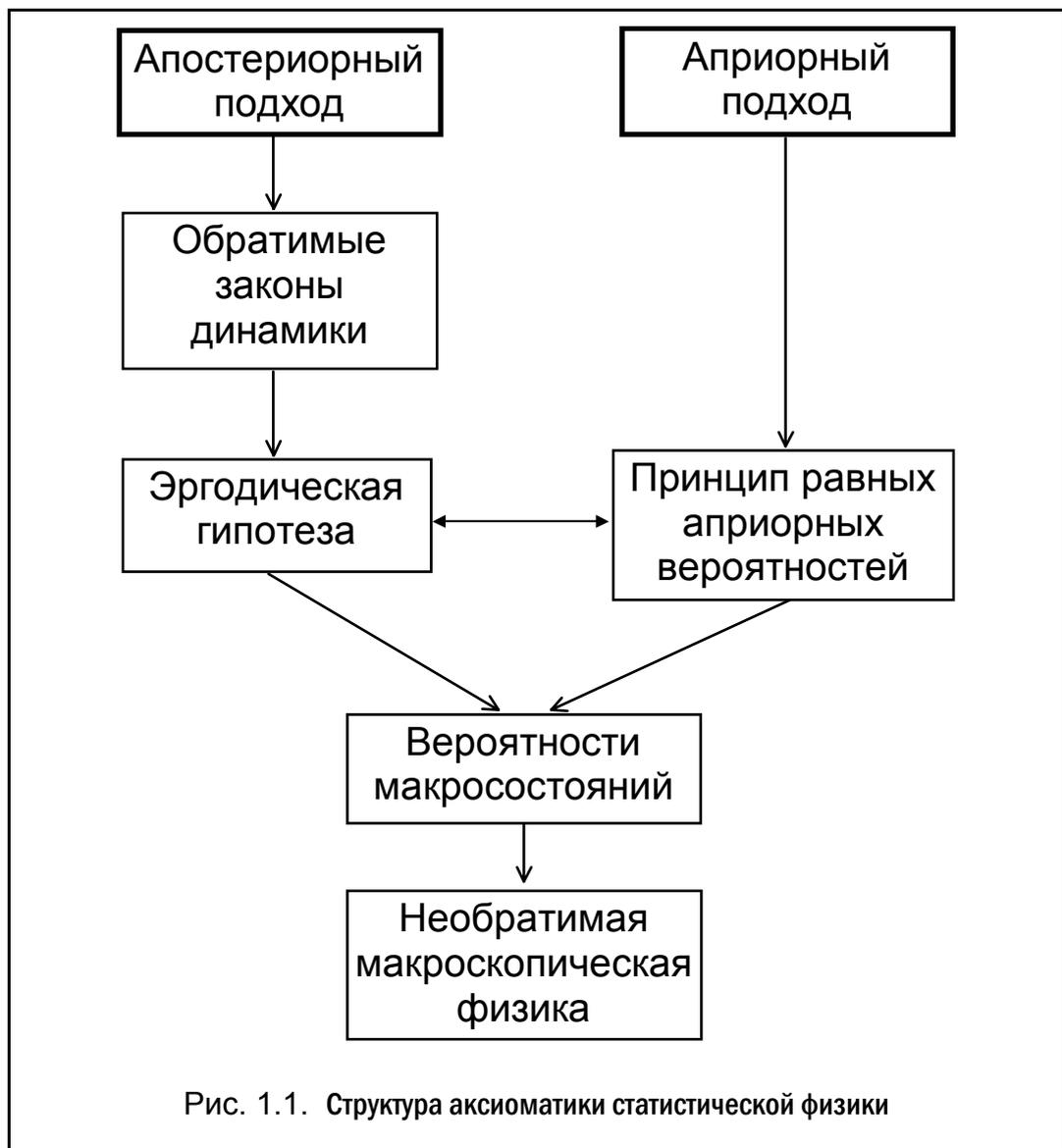


Рис. 1.1. Структура аксиоматики статистической физики

Краткое обобщение содержания главы № 1

- Аксиоматические принципы ныне имеющегося аппарата статистической физики носят характер *априорных* постулатов, декларируемых без каких-либо доказательств, — как некие правдоподобные самоочевидные гипотезы¹.
- Все известные попытки *апостериорного* доказательства корректности вышеупомянутых аксиоматических принципов пока не увенчались успехом².
- Аксиоматика как теории неравновесных процессов, так и теории равновесных систем, в конечном счете, сводится к одному и тому же постулату³, а именно: система с одинаковой вероятностью может быть обнаружена в любом из микросостояний, образующих её равновесное макросостояние.
- *Никем не доказан* запрет на существование реальных физических систем, модельное описание которых может быть адекватно реализовано только заведомо вне области применимости указанного аксиоматического постулата статистической физики.

В следующей главе анализируется выполнимость рассматриваемых аксиоматических принципов в реальных физических системах (на примере исследования граничных эффектов в замкнутых системах, содержащих невырожденный газ квантовых частиц).



¹ Спорный характер этого подхода обсуждался во Введении к настоящей работе.

² Возможно, что данное отсутствие успеха является следствием ограниченной корректности именно самих декларируемых постулатов. В таком случае не приходится ожидать появления в будущем более удачных вариантов их апостериорного обоснования.

³ См., например, [02, стр. 40-45].

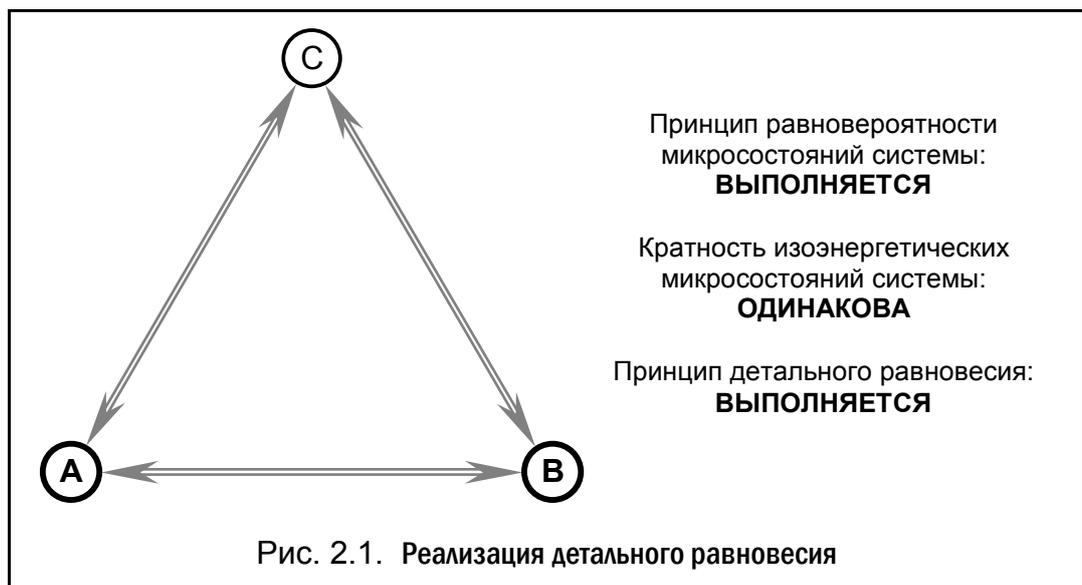
2. Анализ выполнимости аксиоматических принципов

Рассмотрим конкретные аспекты выполнимости аксиоматических принципов статистической физики для замкнутой физической системы.

Аксиоматические принципы и детальное равновесие

Как уже говорилось ранее, аксиоматика статистической физики сводится к принципу равновероятности пребывания¹ равновесной замкнутой физической системы во всех доступных ей микросостояниях. Данный постулат, в свою очередь, предполагает, что *средняя по времени* вероятность прямого и обратного перехода системы между двумя выделенными группами микросостояний в доступной области фазового пространства — должна быть одинакова в обоих направлениях (это следует из определения равновесного состояния, которое содержит требование стационарности).

Более того, обычно декларируется, что статистическое равновесие в замкнутой системе обязано осуществляться непременно *детальным* образом. Иначе говоря, в состоянии детального равновесия для любой пары доступных системе микросостояний "А" и "В" среднестатистическая вероятность перехода в единицу времени из состояния "А" в состояние "В" должна быть равна аналогичной вероятности обратного перехода, т. е. из состояния "В" в состояние "А" ([02, стр. 402-403], [19, стр. 73, 200-201], [34, стр. 324-325, 338], [36, стр. 675-676, 681-683], [38, стр. 225], [51, стр. 136-137] и др.):

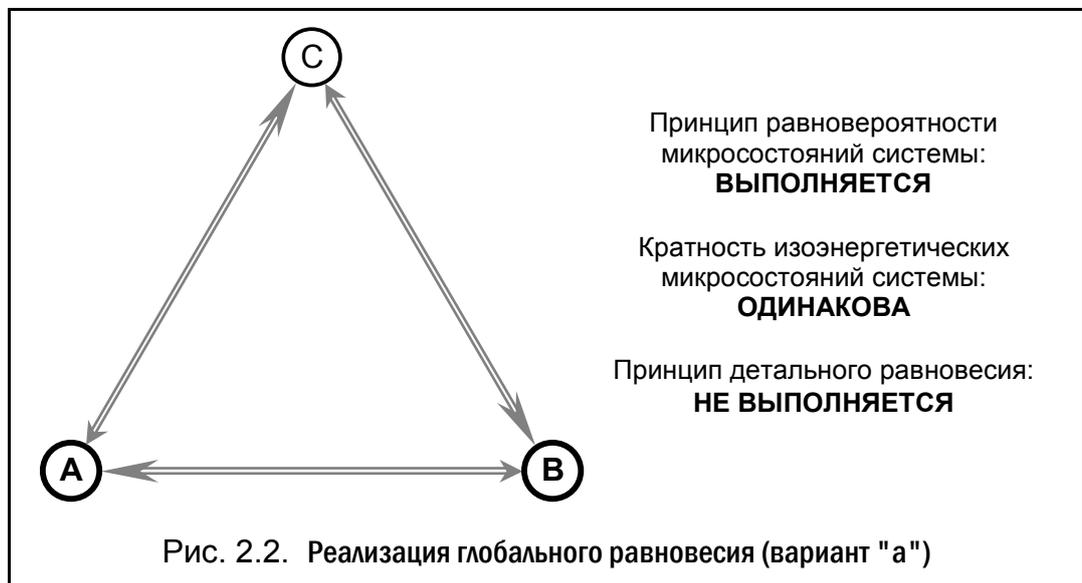


Поясним это на следующем примере. Пусть имеется изолированная физическая система, пребывающая в состоянии *детального* статистического равновесия. Рассмотрим два некоторых выделенных микросостояния системы — "А" и "В" (см. рис. 2.1). Средние по времени вероятности прямого и обратного переходов $A \leftrightarrow B$ одинаковы по определению. Кроме того, имеются варианты опосредованного перехода из состоя-

¹ В квантовой механике считается методологически более правильным говорить не о равновероятности *пребывания*, а о равной вероятности *обнаружения* системы в том или ином микросостоянии.

ния "А" в состояние "В" и обратно «транзитом» через другие состояния, например через "С". Последнее обстоятельство нуждается в особой оговорке. В классической статистической физике использование теоремы Лиувилля и микроканонической гипотезы предполагает наличие *единственной и непрерывной* фазовой траектории, т. е. из каждого конкретного микросостояния физическая система может перейти только в одно из двух других микросостояний (в зависимости от знака времени), непосредственно примыкающих к ней на линии фазовой траектории с одной и с другой стороны. Следовательно, изображённая на рис. 2.1 ситуация является возможной в случае, если *вся* фазовая траектория состоит всего лишь из трёх изображённых микросостояний: "А", "В" и "С".

Справедливости ради следует заметить, что принцип детального равновесия не является следствием аксиоматических принципов статистической физики, и потому, строго говоря, не обязателен к применению в рамках указанной аксиоматики. Возможны ситуации, когда принцип равновероятности доступных микросостояний в замкнутой системе выполняется, а принцип детального статистического равновесия – нет¹:



Изображённая на рис. 2.2 схема реализации *глобального* статистического равновесия не является сугубо теоретической. Давно известно², что в квантовой механике³ принцип детального равновесия не соблюдается для частиц, обладающих спиновыми моментами. Однако принцип неразличимости квантовых частиц делает детальное равновесие формально корректным при учёте вероятностей, усреднённых по спинам начального и конечного состояний [34, стр. 324-325]. На макроскопическом уровне эти особенности отдельных актов переходов никак не проявляются, что дало основания называть такого рода отклонения от детального равновесия «не слишком сильными».

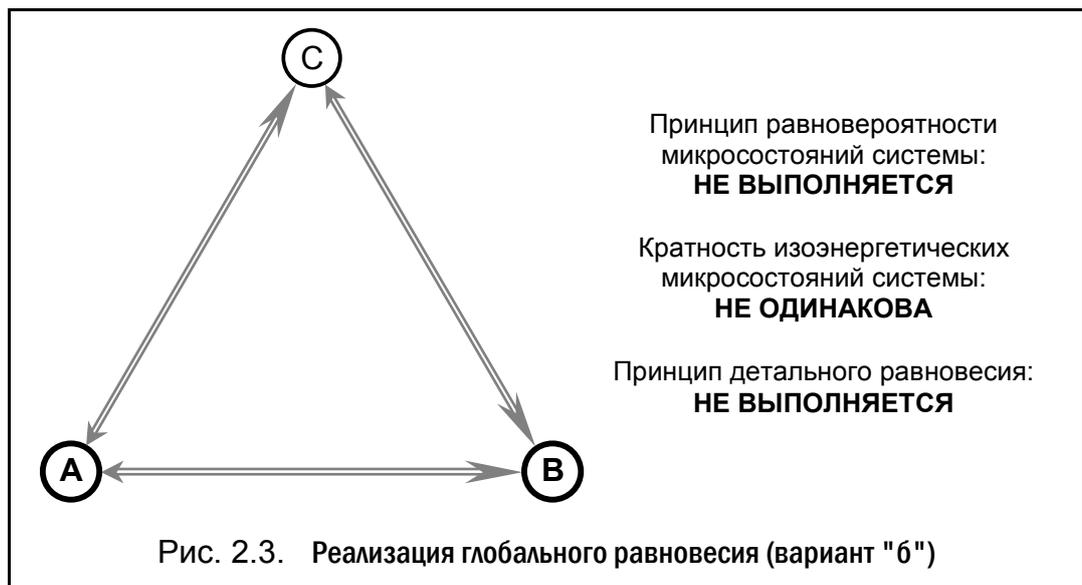
¹ Но не наоборот!

² Наиболее ранние работы по этому поводу: W. Heitler. Quantum Theory of Radiation, 252, 2nd Edition, 1944 ; J. Hamilton, H. Peng. Proc. Roy. Ir. Ac., 49 A, 197, 1944.

³ Даже в классической механике принцип детального равновесия верен лишь в предположении о сферической симметрии частиц газа. Ещё Л. Больцманом было отмечено, что для частиц несферической формы этот принцип несправедлив [34, стр. 338].

В контексте же настоящей работы более интересен подход к данному вопросу, изложенный Д. И. Блохинцевым в его статье "Принцип детального равновесия и квантовая механика"¹. В этой статье, в частности, показано, что в случае центрального закона взаимодействия между частицами принцип детального равновесия выполняется безусловно. Однако для взаимодействий, зависящих от угловых координат, требуется специальное рассмотрение, так как принцип детального равновесия в таких случаях выполняется не всегда [04, стр. 171-174], [05, стр. 928].

В текущем проекте предпринята попытка доказательства реальности существования физических систем, в которых статистическое равновесие реализуется по схеме, изображённой на рисунке 2.3:

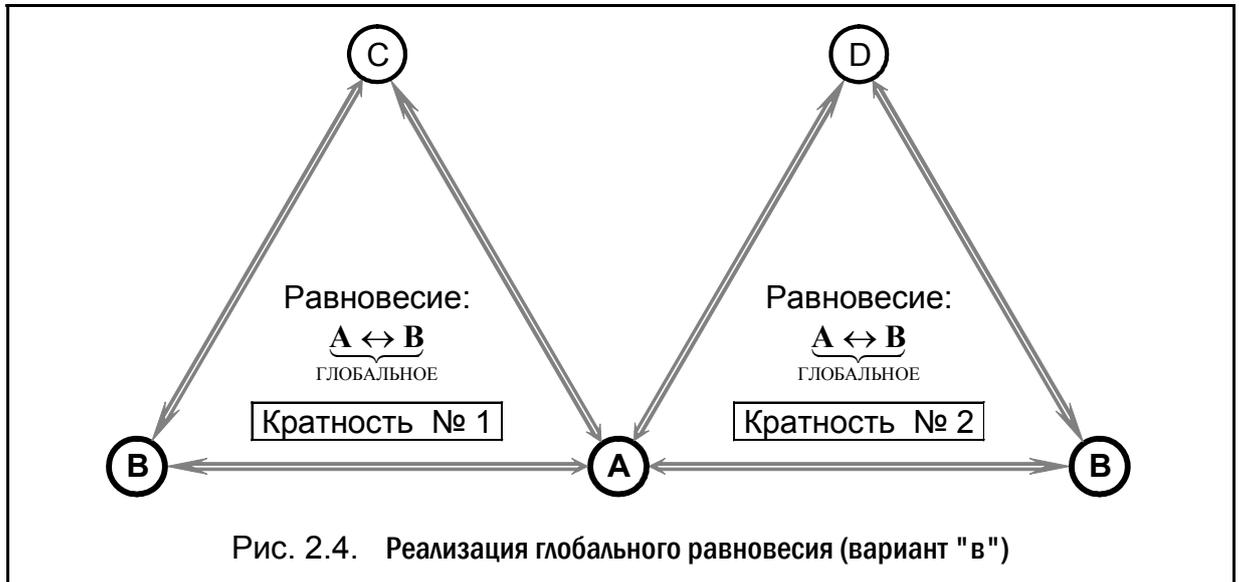


Качественное отличие глобального равновесия, изображённого на рис. 2.3, от также глобального равновесия, схема которого приводилась ранее на рис. 2.2, состоит в следующем. В фазовом пространстве, фрагмент которого приведён на рис. 2.3, должны существовать некоторые равновеликие по объёму области, усреднённая по времени вероятность перехода между которыми будет отличаться в прямом и обратном направлениях (на рис. 2.3 видно, что вероятность перехода в состояние "А" из других состояний меньше, чем вероятность ухода из него; для состояния "В" — наоборот).

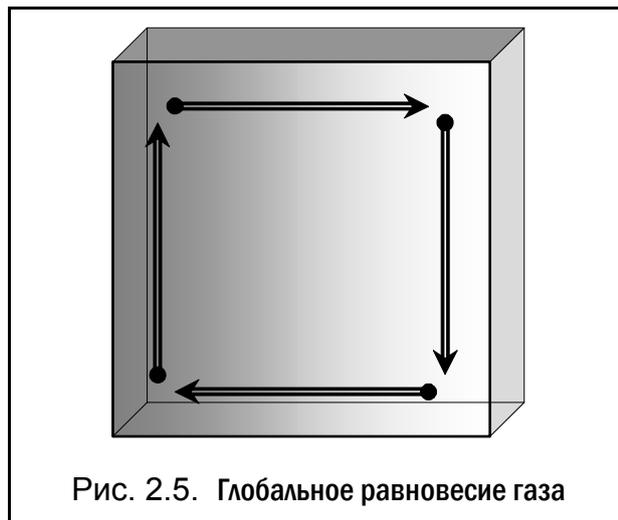
Очевидно, что если бы пропорции в количестве микросостояний различного вида соответствовали тому, что изображено на рис. 2.3, то данная физическая система не была бы стационарной, а значит и равновесной. Равновесие в этом случае возможно только тогда, когда в фазовом пространстве имеется различная *кратность* выделенных групп микросостояний. В статистической физике эта ситуация считается нереализуемой в пределах единой изоэнергетической поверхности. При рассмотрении же областей фазового пространства, принадлежащих *разным* энергетическим слоям, такое вполне реально. Например, частицам равновесного газа с максвелловским распределением по уровням энергии — соответствует их не одинаковая количественная кратность для различных изоэнергетических групп. Эта кратность компенсирует разницу в вероятностях отдельных переходов частиц между состояниями с не одинаковой энергией.

¹ Д. И. Блохинцев, ЖЭТФ 17, 924 (1947), [05].

На рис. 2.4 как раз изображён тот случай, когда в равновесной изолированной физической системе отсутствие равновероятности отдельных изоэнергетических микросостояний компенсируется различной количественной кратностью этих состояний.



Важной особенностью глобального статистического равновесия, реализуемого по схеме на рис. 2.4, является его существенное отличие от других известных вариантов глобального равновесия (см. рис. 2.2) на *макроскопическом* уровне. Дело в том, что в физической системе, в которой имеет место такое равновесие, одинаковые по объёму области доступного фазового пространства должны «посещаться» системой не одинаково часто. Следовательно, различные макроскопические состояния, определяемые совокупностью микросостояний из соответствующих фазовых областей, будут осуществляться с различной вероятностью.



На рис. 2.5 дана графическая иллюстрация вышеописанного состояния глобально-статистического равновесия. В изображённом изолированном сосуде наиболее вероятное состояние содержащегося в нём газа реализуется «анизотропным образом». При этом имеет место неоднородная концентрация частиц в различных частях объёма сосуда (какие-либо внешние потенциальные поля в системе отсутствуют). Кроме того,

существуют постоянно направленные замкнутые (вихревые) потоки частиц, осуществляющие некие процессы переноса. Важно отметить, что эти макроскопические эффекты имеют стационарный (не флуктуационный) характер и являются прямым следствием не одинаковой вероятности пребывания системы в различных областях доступного ей фазового пространства. В частности, неоднородная плотность вероятности пребывания системы в разных частях фазового подпространства *импульсов* обеспечивает наличие *потоков* частиц. Аналогичная неоднородность применительно к *геометрическому* подпространству — создаёт *градиент концентрации* частиц внутри сосуда.

Условие корректности аксиоматики статистической физики

Предположим, что реально существуют физические системы, для которых их состояния статистического равновесия реализуются вышеописанным глобальным (но не детальным) образом. Более того, указанные состояния осуществляются по схеме, предполагающей различную кратность пребывания этих систем в отдельных доступных им изоэнергетических микросостояниях. Данные системы могли бы обладать совершенно особыми практически полезными макроскопическими свойствами. Наличие указанных свойств принципиально не противоречит выводам таких научных дисциплин, как статистическая физика и термодинамика, поскольку рассмотрение этих систем находится за пределами «зоны ответственности» модельных представлений упомянутых наук¹.

Определим направление, в котором следует выполнять поиск физических систем данного специального типа. Очевидно, что надо попытаться найти такие варианты реализации *квантовых* процессов, при осуществлении которых имела бы место различная средняя вероятность прямого и обратного перехода (в единицу времени) системы между двумя равновеликими областями доступного фазового пространства. Как уже было показано ранее, наличие процессов *перехода* с такого рода «несимметричной вероятностью» — автоматически обеспечивает и существование не одинаковой вероятности *пребывания* (обнаружения) системы в разных участках фазового объёма.

Ограничим круг рассматриваемых явлений анализом динамики частиц невырожденного квантового газа, содержащегося в некотором изолированном объёме постоянной величины (требование замкнутости системы). Будем также считать данный газ *идеальным* в том смысле, что взаимодействием отдельных частиц между собой² можно пренебречь. Для фотонного газа требование идеальности выполняется почти всегда³. Для других случаев выполнение этого требования вводит надлежащее ограничение на объёмную концентрацию соответствующего вида частиц в системе.

Вышеупомянутое свойство идеальности газа позволяет при исследовании поведения системы, состоящей из N частиц, свести рассмотрение $6N$ -мерного фазового γ -пространства *всей* физической системы к анализу динамики *отдельных* частиц газа,

¹ См. Введение к настоящей работе.

² Для совокупностей частиц, имеющих электрический заряд, учёт коллективных свойств этих частиц может быть выполнен путём переопределения их результирующего самосогласованного электромагнитного поля — как внешнего макроскопического поля для каждой частицы.

³ Кроме случаев, когда существенны проявления нелинейных эффектов в оптически плотных средах [43, стр. 211], или, например, когда необходимо учитывать гравитационное взаимодействие фотонов, что характерно для астрофизических процессов.

каждая из которых пребывает в своём индивидуальном шестимерном фазовом μ -пространстве. Этот подход, реализованный, например, в так называемом методе «пробной частицы», позволяет получить полностью объективные¹ значения макроскопических параметров системы за счёт естественного временного усреднения² характеристик движения единичной наблюдаемой частицы газа.

В рамках описываемой физической модели будем исследовать процессы *изоэнергетического* перехода отдельных частиц из одних состояний в другие. Такого рода переходы имеют место в тех случаях, когда присутствует упругое рассеяние частиц на границах содержащего их объёма или на каких-либо внутриобъёмных центрах. Как будет показано в дальнейшем, во многих практически значимых случаях изоэнергетические процессы релаксации импульсов количественно доминируют над неупругими процессами рассеяния частиц. Это обуславливает ведущую роль именно изоэнергетических процессов в формировании соответствующих макроскопических состояний.

Будем также считать, что средняя длина свободного пробега " ℓ " частиц за некоторое среднее время " τ " между отдельными актами релаксации их импульса³ — имеет существенно бóльший порядок величины по сравнению с длинами волн " λ " де Бройля, типичными для частиц исследуемого газа. Это даёт возможность использовать для описания эволюции системы «смешанную» модель, общепринятую в таких случаях: акты рассеяния частиц рассматриваются как индетерминированные квантовые процессы, а динамика этих частиц в промежутках времени между актами их рассеяния (так называемый «свободный пробег») представляется как строго детерминированное движение локализованных в пространстве классических частиц.

Линейные размеры " L " замкнутого объёма, содержащего газ квантовых частиц, должны быть сопоставимы по порядку величины со средней длиной свободного пробега " ℓ " этих частиц. Данное свойство характеризуется значением числа Кнудсена физической системы, не меньшим единицы, что обеспечивает постоянное пребывание основного количества частиц газа в кнудсеновской области («газ Кнудсена⁴»). Как будет показано в дальнейшем, такое требование *не непрерывного* поведения исследуемого газа является существенно необходимым⁵ [17, стр. 56], [27, стр. 413], [28, стр. 273].

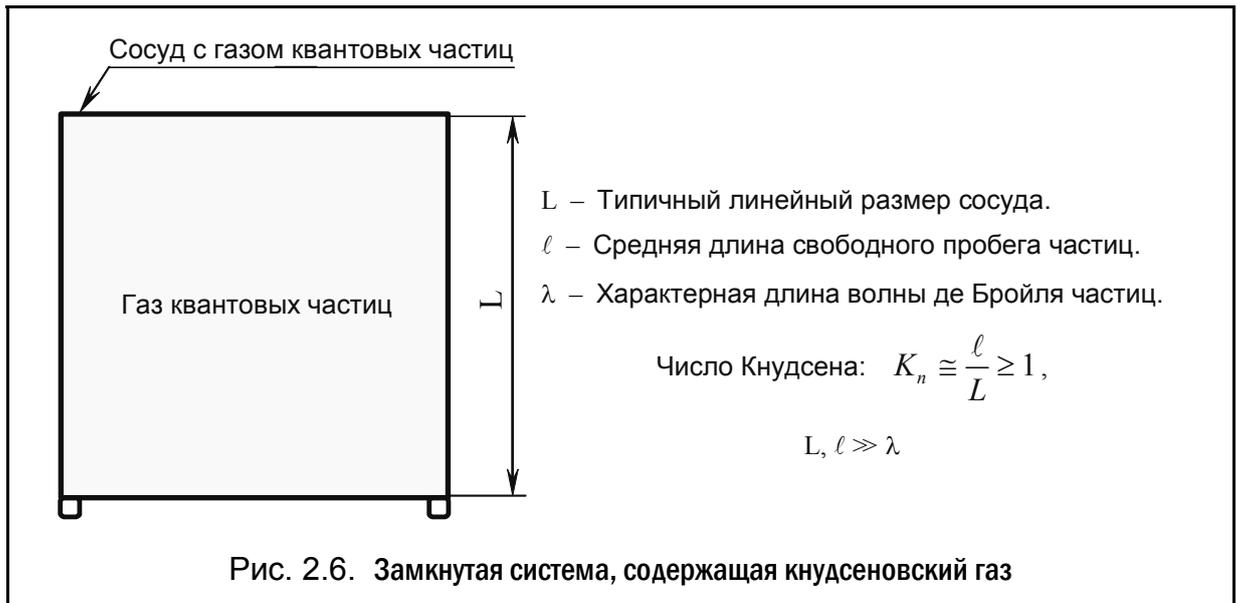
¹ Т. е. не использующие при своём выводе априорные аксиоматические принципы.

² Как уже говорилось ранее, именно такое усреднение (т. е. усреднение *по времени*) требуется непосредственно самим определением макроскопических параметров.

³ Данная формулировка предполагает корректность понятия τ -приближения, а именно: частица в промежутках времени между актами рассеяния движется свободно, как квазиточечный волновой пакет. Перемещение центра плотности «объёма вероятности» этого пакета — тождественно динамике классической корпускулярной частицы, которая в течение времени " τ " своего «свободного пробега» взаимодействует только с макроскопическими силовыми полями (если таковые есть) [11, стр. 54-59].

⁴ В молекулярной динамике этот газ принято называть «свободномолекулярным».

⁵ Заметим, что свойство не непрерывного поведения газа — не следует автоматически из требования его идеальности. Идеальность газа означает только отсутствие столкновений его частиц *между собой*. Пребывание же газа в кнудсеновской области предполагает малую вероятность *любого вида* внутриобъёмного рассеяния частиц.



Сформулируем теперь те свойства изображённой на рис. 2.6 системы, наличие которых обязательно с точки зрения соблюдения аксиоматики статистической физики. Указанные свойства сводятся к декларации ряда обобщённых требований, предъявляемых ко всему допустимому множеству параметров релаксации импульсов частиц квантового газа, — как на внутриобъёмных центрах рассеяния (если такие центры есть), так и на границах занимаемого газом объёма системы.

Упомянутые параметры релаксации представляют собой не что иное, как индикатрисы¹, характеризующие плотность вероятности рассеяния частицы в различных угловых направлениях. При этом вектор импульса частицы может менять свою ориентацию в геометрическом пространстве, но его абсолютная величина остаётся неизменной (как было решено ранее, рассмотрению подлежат только изоэнергетические процессы упругого рассеяния).

Принципиально важным обстоятельством является то, что в рассматриваемых случаях каждый отдельный акт рассеяния частицы является индуцированным² процессом. Для осуществления перехода частицы между различными частями её фазового μ -пространства требуется обязательное наличие самого факта события взаимодействия (столкновения) данной частицы с тем или иным рассеивающим элементом системы.

Таким образом, вероятность перехода частицы между двумя её микросостояниями³ определяется, в свою очередь, следующими различными группами вероятностей:

¹ *Индикатриса* — функциональная зависимость какой-либо величины от угловых направлений, как правило, в геометрическом пространстве.

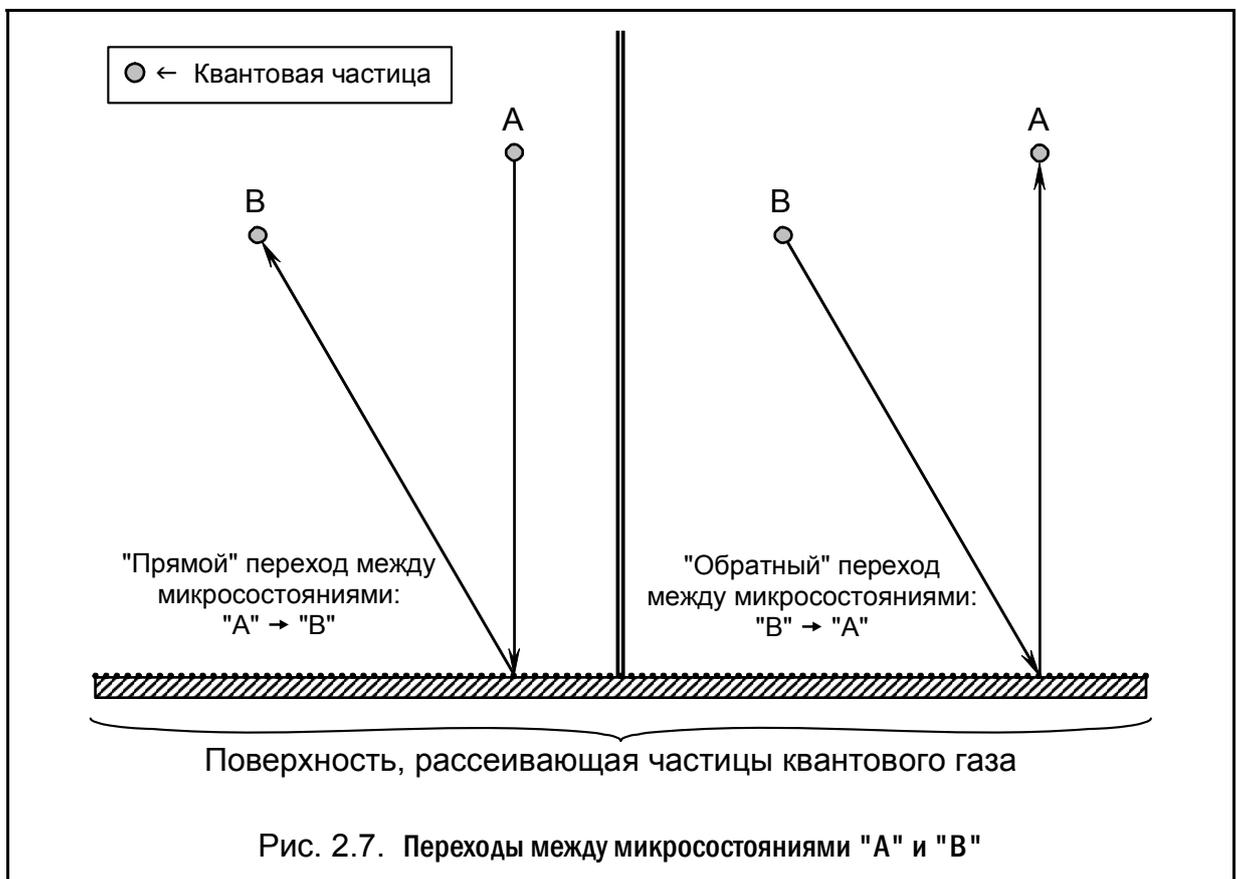
² *Индукцированный* — вынужденный, обусловленный внешним воздействием.

³ Применительно к квантовой системе не представляется возможным точно локализовать положение микросостояния частицы в её фазовом пространстве (вследствие неопределённостей Гейзенберга любое микросостояние занимает в μ -пространстве некоторый конечный объём, больший нуля). Данное обстоятельство позволяет корректно использовать понятие именно *вероятности*, а не *плотности вероятности*, как это требуется для случая строго детерминированного описания классической системы.

- a). Вероятность *реализации самого факта* события, инициирующего квантовый переход рассматриваемой одночастичной системы (метод «пробной частицы») из её текущего микросостояния в любое другое микросостояние, совместимое с текущим.
- b). Вероятность некоторого *конкретного исхода* события квантового перехода, выделенного из множества допустимых вариантов. При этом уже известно, что сам факт события перехода — точно имеет место. Иначе говоря, в данном случае речь идёт об «условной вероятности по Байесу» [09, стр. 35-36, 81], [12, стр. 443-444, 450], [16, стр. 312-315], [25, стр. 552], [31, стр. 109-115], [33, стр. 53-54, 64-66].

Вероятность исхода индуцированного события квантового перехода

Рассмотрим вероятности как прямого, так и обратного перехода частицы между двумя выделенными микросостояниями "А" и "В" в её фазовом μ -пространстве. При этом будем считать, что имеет место вышеуказанный случай "b", т. е. сам факт *некоторой* реализации обоих видов переходов — осуществляется безусловно:



В классической физике равенство вероятностей прямого и обратного переходов обусловлено детерминированным и обратимым во времени характером соответствующих законов динамики: если для некоторых заданных условий (параметры движения частицы, свойства рассеивающей поверхности) имеется отличная от нуля вероятность перехода из микросостояния "А" в микросостояние "В", то:

- Указанная вероятность перехода из состояния "А" в состояние "В" строго равна единице (отсутствие индетерминированности, т. е. «вероятностной размытости» событий, определяемых классическими законами).

- Вероятность перехода из состояния "В" в состояние "А" — также равна единице (следствие обратимости законов классической динамики во времени).

При этом обычно принимается ряд предположений достаточно общего характера. В частности считается, что непосредственно перед столкновением с рассеивающим элементом частицы движутся по прямолинейным траекториям [28, стр. 206]. Уточнение такого рода упрощает определение угловых характеристик траекторий частиц до и после столкновения, и, в частности, делает необязательной оговорку о необходимости изменения знака магнитной индукции¹ (если она не равна нулю) в системе при раздельном рассмотрении прямого и обратного переходов между микросостояниями. Все отклонения от описываемой равновероятности переходов, гипотетически существующие для, например, частиц несферической формы [34, стр. 338], если и могут себя проявлять, то лишь на микроуровне, т. е. в рамках единичных актов рассеяния.

В квантовой физике также считается, что имеет место равенство вероятностей² во времени прямого и обратного переходов между двумя выделенными микросостояниями. Это равенство реализуется в рамках так называемой *СРТ-теоремы Паули–Людерса*: если в природе есть вероятность осуществления некоторого процесса, то точно с такой же амплитудой вероятности в ней осуществим и некий сопряженный процесс, в котором частицы заменены соответствующими античастицами, проекции их спинов и импульсов изменили знак, а начальное и конечное положение частиц в геометрическом пространстве – поменялись местами. В настоящей работе уместно использовать менее строгое, чем СРТ-теорема, понятие *T-инвариантности*, означающее симметрию вероятности осуществления физического процесса относительно инверсии знака времени³.

Приведём несколько типичных цитат по этому поводу. Характерный взгляд на данный вопрос можно, например, обнаружить в книге А. И. Ансельма "Основы статистической физики и термодинамики" [02, стр. 402-403]:

“В случае равновесного состояния электронного газа $f(\mathbf{v}) = f_0(v)$ и $f(\mathbf{v}') = f_0(v')$, где f_0 – равновесная функция распределения Ферми или Максвелла⁴.

Если рассеяние электронов происходит упруго, т. е. без изменения энергии ($\varepsilon = m \cdot v^2 / 2 = \varepsilon' = m \cdot v'^2 / 2$), то $v = v'$. В этом случае при равновесии

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = 0 = f_0(v) \cdot [1 - f_0(v)] \cdot \int \{W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')\} \cdot d\mathbf{v}'.$$

¹ В классической механике обратимость во времени имеет место в случае инвариантности внешних сил относительно перемены знака скоростей частиц [05, стр. 924].

² В отличие от классической физики, в квантовой механике вероятности переходов между состояниями почти никогда реально не равны в точности нулю или единице, что объясняется индетерминированным характером рассеяния частиц.

³ *T-инвариантность* нарушается лишь в процессах, заведомо не имеющих отношения к предмету настоящей работы, например, при слабых распадах K^0 , B^0 и D^0 - мезонов.

⁴ Корректнее было бы определить равновесную функцию, как *некую* функцию распределения, соответствующую наиболее вероятному макросостоянию системы – В. С.

Отсюда следует, что

$$W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = W(\mathbf{v}, \mathbf{v}'), \quad (5.5)$$

т. е. вероятности прямых и обратных переходов одинаковы. Условие (5.5) носит название *принципа детального равновесия*.

Очевидно, что соотношение (5.5), относящееся к элементарному акту рассеяния, не зависит от того, находится ли электронный газ в равновесном или неравновесном состоянии [выделено мной – В. С.]”.

В книге Д. И. Блохинцева "Основы квантовой механики" вышеописанная равновероятность прямых и обратных переходов между различными состояниями квантовой физической системы именуется как *принцип детального баланса*. Данный принцип здесь определён на основе рассмотрения акта рассеяния частиц в рамках модельных представлений матричной механики Гейзенберга:

$$\hat{S} = \hat{S}(+\infty, -\infty) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \hat{S}(t, t_0)$$

где \hat{S} – унитарный оператор, представляющий собой так называемую *матрицу рассеяния*. Матричные элементы оператора $\hat{S}(t, t_0)$ определяют вероятности переходов из одного квантового состояния в другое: $P_{mn}(t, t_0) = |S_{mn}(t, t_0)|^2$, где $P_{mn}(t, t_0)$ – это вероятность перехода системы из состояния $L = L_n$ (момент времени t_0) в состояние $L = L_m$ (момент времени t). Именно такой подход является наиболее адекватным для случая, когда свободная частица осуществляет индуцированный (в результате акта рассеяния на препятствии) переход из одного удалённого ($t_0 \rightarrow -\infty$) чистого¹ состояния в другое удалённое ($t \rightarrow +\infty$) чистое состояние, что, например, характерно для случая дифракции Фраунгофера [04, стр. 174]:

“В квантовой статистике широко используется так называемый *принцип детального баланса*. Согласно этому принципу вероятность перехода из состояния n в состояние m равна вероятности перехода из состояния m в состояние n за тот же промежуток времени. На самом деле этот принцип имеет весьма ограниченное значение. Он верен лишь в первом приближении теории возмущений. Он верен также в некоторых специальных случаях, когда силы, действующие между частицами, — центральные.

Принцип детального баланса был бы верен точно в том случае, если бы матрица \hat{S} была бы эрмитовой. На самом деле она есть матрица унитарная; поэтому величина $|S_{mn}|^2$, вообще говоря, не равна величине $|S_{nm}|^2$.

¹ Здесь под «чистым» состоянием частицы понимается такое состояние одночастичной системы, которое является максимально полным для заданных условий. В частности, для *свободной* частицы могут быть одновременно и абсолютно точно (без какой-либо вероятностной дисперсии) заданы три составляющие её импульса p_x , p_y и p_z . При этом координаты частицы оказываются совершенно не определёнными, так как состояние системы описывается плоской волной де Бройля, и частица не имеет пространственной локализации [02, стр. 78], [10, стр. 175-176], [34, стр. 376-379].

Отсюда не следует делать заключения о необратимости квантовой механики. Известно из классической механики, что если силы не зависят от скоростей, то изменение скоростей всех частиц на обратные ведёт к тому, что всё движение воспроизводится в обратном порядке.

Можно доказать, что при этих же условиях и в квантовой механике имеет место совершенно такая же обратимость. Именно, вероятность за время t перейти из состояния, характеризуемого импульсами частиц p_1^0, p_2^0, \dots (состояние α), в состояние с импульсами p_1, p_2, \dots (состояние β) равна вероятности за такой же отрезок времени перейти из состояния, характеризуемого обращёнными импульсами $-p_1, -p_2, \dots$ (обращённое состояние β), в состояние с импульсами $-p_1^0, -p_2^0, \dots$ (обращённое состояние α)¹.

В книге Ю. Б. Румера и М. Ш. Рывкина "Термодинамика, статистическая физика и кинетика" равновероятность прямых и обратных переходов между состояниями квантовой физической системы анализируется в рамках модельных представлений, основанных на уравнении Шредингера. Получаемые при этом результаты, естественно, тождественны тем, что имели место при использовании аппарата матричной механики Гейзенберга [34, стр. 324-325, 338]:

“Введём теперь важный физический закон, называемый *принципом детального равновесия*. Законы, определяющие изменение микросостояний системы во времени, это – либо законы классической механики, либо законы квантовой механики. В случае замкнутой системы и те и другие законы симметричны по отношению к изменению знака времени – замене t на $-t$. В классической механике это следует из того, что основное её уравнение

$$m_i \cdot \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i.$$

второго порядка по отношению ко времени. Поэтому при замене t на $-t$ левая часть этого уравнения инвариантна, а правая часть, вообще, не содержит t явно. В квантовой механике бесспиновых частиц это следует из того, что замена t на $-t$ превращает уравнение Шредингера для волновой функции $\psi(q_i, t)$ системы

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

в уравнение для комплексно сопряжённой функции

$$-i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^*,$$

(для системы частиц, не имеющих спина, гамильтониан \hat{H} вещественен). Но комплексно сопряжённая волновая функция $\psi^*(q_i, t)$ опи-

¹ См. по этому поводу работу автора, Д. И. Блохинцев, ЖЭТФ 17, 924 (1947), где подробно рассмотрен этот вопрос — примечание цитируемого автора, [05].

сывает то же самое состояние, что и $\psi(q_i, t)$, но с изменённым знаком вектора плотности тока вероятности \mathbf{j} . С другой стороны, при замене t на $-t$ начальное и конечное состояния системы меняются местами. Поэтому вероятность прямого и обратного перехода $x \rightarrow y$ и $y \rightarrow x$ должны быть одинаковыми и функция $w(y, x | \tau, t)$ должна быть симметричной по первой паре аргументов:

$$w(y, x | \tau, t) = w(x, y | \tau, t). \quad (64.6)$$

Это утверждение и называется принципом детального равновесия.

Этот принцип в такой форме справедлив для замкнутой системы частиц без спина, причём и в том случае, если система находится в независимом от времени внешнем поле (все предшествующие рассуждения остаются справедливыми и в этом случае). В случае системы частиц, имеющих спиновые моменты, соотношение (64.6) уже не является справедливым. Можно, однако, доказать, что в этом случае принцип детального равновесия справедлив для вероятностей, усреднённых по спинам начального и конечного состояний.

Заметим, наконец, что название «принцип детального равновесия» связано с тем, что равенство (64.6) справедливо для любых двух пар точек x, y и динамическое равновесие чисел заполнения поддерживается переходами из x в y и из y в x непосредственно (по схеме: $x \leftrightarrow y$), а не посредством промежуточных состояний z (не по схеме: $x \leftrightarrow y + x \leftrightarrow z \leftrightarrow y$).

.....

Будем считать, что имеет место принцип детального равновесия. С квантовомеханической точки зрения это значит, что мы либо рассматриваем газ бесспиновых частиц, либо проводим усреднение по спинам начального и конечного состояний. С точки зрения классической механики это означает предположение о сферической симметрии частиц газа (ещё самим Больцманом было отмечено, что для частиц несферической формы принцип детального равновесия несправедлив)".

Естественно, во всех цитируемых случаях обращает на себя внимание тот факт, что декларируемую равновероятность переходов относят к *единице времени*, а не к *числу самих событий* переходов. Тем не менее, при изоэнергетическом характере индуцируемых процессов рассеяния и одинаковой кратности начального и конечного квантовых состояний, описанные равные вероятности переходов во времени означают среднестатистическую равновероятность исходов именно *единичных актов* рассеяния.

Действительно, изоэнергетический («упругий») характер рассеяния частиц предполагает сохранение первоначального числа этих частиц по окончании процесса перехода системы из одного состояния в другое¹. Следовательно, число частиц, участвую-

¹ Например, при упругом рассеянии частиц на некоторой поверхности, для молекулярного газа исключается из рассмотрения явление абсорбции, для газа электронов проводимости в твёрдом теле — рекомбинации, а для фотонного газа — процессы поглощения световых квантов.

щих как «прямом», так и в «обратном» переходах, должно совпадать. Это, собственно, и означает одинаковую кратность обоих рассматриваемых состояний системы.

При рассмотрении рассеяния частиц поверхностью¹ из одного удалённого чистого состояния в другое (см. рис. 2.7), становится очевидным следующее. За одинаковые промежутки времени, в течение которых осуществляются «прямой» и «обратный» переходы между состояниями одинаковой кратности "А" и "В", число событий столкновений частиц со стенкой — обязательно будет равным для обоих случаев переходов.

Таким образом, сравнивая параметры изоэнергетических индуцированных переходов квантовой системы между двумя чистыми состояниями в «прямом» и «обратном» направлениях, можно утверждать следующее:

- Кратность начального и конечного состояний системы — всегда одинакова.
- Количество актов инициирования (индукции) переходов, определяемое числом столкновений частиц с рассеивающими элементами системы, также одинаково.
- Среднестатистическая вероятность перехода системы из одного состояния в другое, *отнесённая к единице времени*, — одинакова в обоих направлениях.
- Во время свободного движения частиц², образующих рассматриваемую систему, их чистые состояния не претерпевают изменений. Собственно процесс перехода между состояниями системы обуславливается актами релаксации импульсов частиц при их столкновении с рассеивающими элементами, например, с какой-либо поверхностью.

Из сказанного, очевидно, что переходы между состояниями непосредственно реализуются лишь при актах рассеяния частиц, а количество этих актов и самих частиц остаётся неизменным вне зависимости от направленности процесса перехода. Следовательно, равновероятность прямого и обратного переходов системы за один и тот же промежуток времени — означает равновероятность прямого и обратного переходов, реализуемых в результате осуществления каждого единичного³ акта рассеяния частиц.

Таким образом, есть основания утверждать, что среднестатистические вероятности⁴ как «прямого», так и «обратного» переходов *в единицу времени* между двумя выделенными изоэнергетическими состояниями замкнутой физической системы (классической или квантовой), могут быть равны между собой лишь при том условии, что имеет место *одинаковое количество* единичных актов рассеяния для обоих направлений за тот же промежуток времени⁵. Иными словами, для осуществления статистического равновесия требуется одинаковая *кратность* (в единицу времени) самих событий релаксаций импульсов для «прямого» и «обратного» направлений.

¹ Именно этот вариант изоэнергетического рассеяния имеет принципиальный интерес.

² Т. е. во время движения в удалённой зоне, отстоящей от рассеивающего элемента на существенно бóльшем расстоянии, чем характерные длины волн де Бройля частиц.

³ Как уже говорилось, для частиц со спином это равенство имеет место после надлежащего статистического усреднения по всем начальным и конечным состояниям.

⁴ Именно такого рода вероятности определяют макроскопические свойства систем, т. е. те их свойства, которые единственно и имеют практическое значение.

⁵ Это утверждение тем более очевидно, что в качестве исследуемого объекта мы имеем право выбрать одночастичную систему или систему идеального газа, сводящуюся к совокупности одночастичных систем.

Вероятность индукции события квантового перехода

Рассмотрим теперь вероятность инициирования (индуцирования) самого факта события перехода из текущего микросостояния системы в одно (классическая физика) или некоторое допустимое множество (квантовая механика) других микросостояний. В частности, оценим указанную вероятность события перехода для диффузного макросостояния газа в изображённой на рис. 2.6 системе.

Диффузное макросостояние газа соответствует его равновесному состоянию в классическом определении данного понятия (см. стр. 12), причём для всех частиц, имеющих одинаковую полную энергию (изоэнергетичность), справедливо следующее:

- Направление движения какой-либо частицы, находящейся в произвольном месте геометрического объёма системы, равновероятно для любой угловой ориентации вектора импульса этой частицы (изотропность импульсов).
- Существует одинаковая вероятность пребывания частиц в различных частях геометрического объёма системы (изотропность концентрации)¹.

Пусть событие перехода реализуется вследствие релаксации импульсов частиц на некоторых внутриобъёмных центрах рассеяния. На рис. 2.8 условно изображена такая картина изотропной внутриобъёмной релаксации:

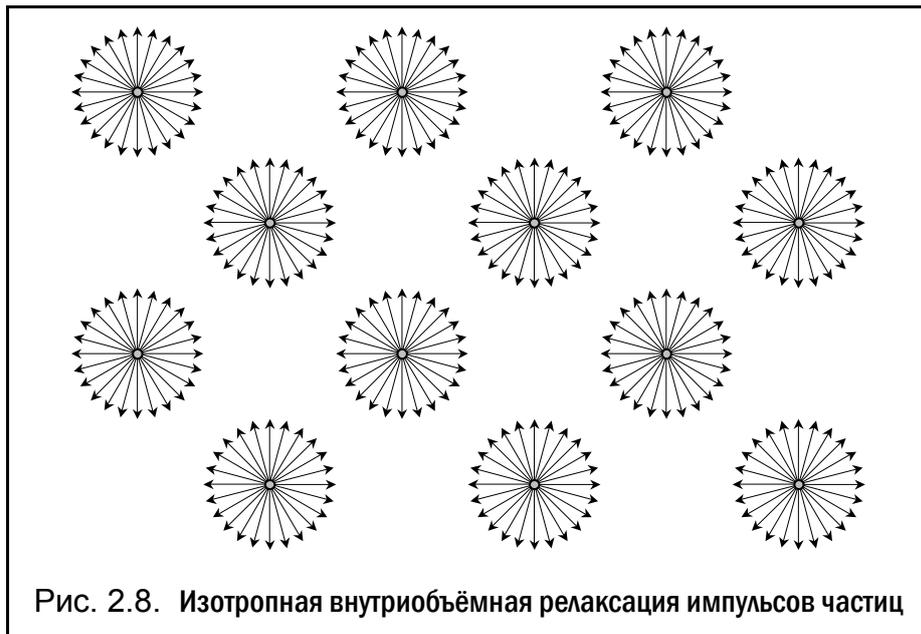
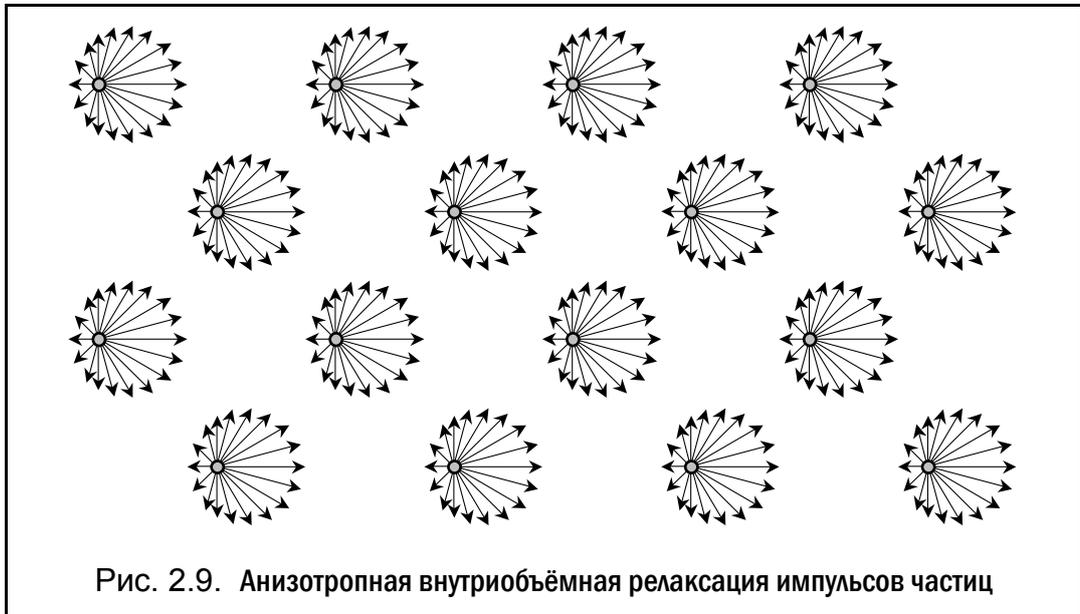


Рис. 2.8. Изотропная внутриобъёмная релаксация импульсов частиц

Поскольку для диффузного газа имеет место изотропный характер концентрации, а также равновероятная направленность движения частиц в занимаемом пространстве, то в этой ситуации нет оснований ожидать наличия какой-либо угловой или пространственной анизотропии в среднестатистической интенсивности (по количеству в единицу времени) столкновений частиц с рассеивающими элементами физической системы.

¹ Напомним, что здесь речь идёт об *изоэнергетических* процессах переходов между состояниями. Поэтому те случаи, когда наличие градиента концентрации частиц обусловлено присутствием каких-либо внешних потенциальных полей (вспомним, хотя бы, барометрическую формулу), к рассматриваемой ситуации отношения не имеют.

Конечно, возможны ситуации, когда внутриобъемная релаксация носит анизотропный характер. В качестве примера приведём макроскопический процесс определённо направленной диффузии газа, вызванный наличием градиента концентрации частиц в занимаемом ими геометрическом объёме. При этом длина свободного пробега частиц, а значит и средняя по времени частота осуществления актов релаксации их импульсов, зависит от направления движения этих частиц в пространстве (см. рис. 2.9):



Однако изображённый на рис. 2.9 случай характерен лишь для неравновесных процессов, в ходе которых осуществляется динамический переход системы из менее вероятного макроскопического состояния — в более вероятное¹.

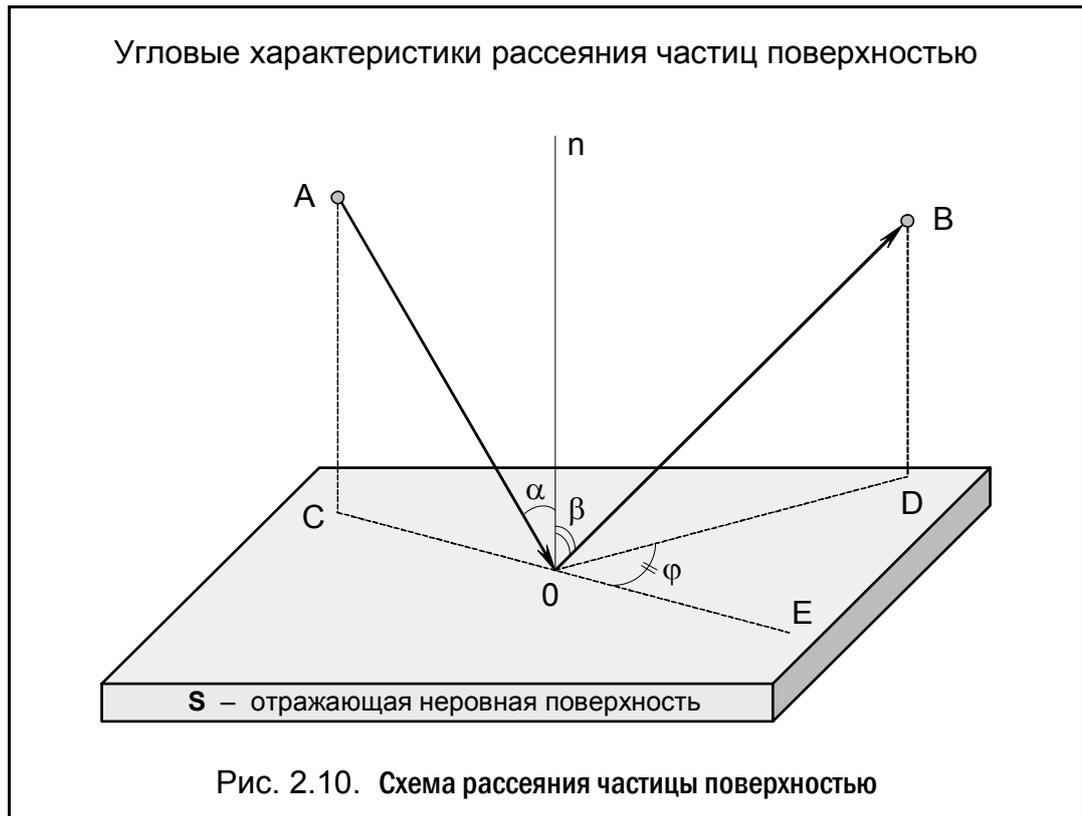
Рассмотрим теперь ситуацию на *границах* геометрического объёма системы, заполненного газом частиц². В этом случае события перехода между микросостояниями реализуются вследствие релаксации импульсов частиц на той поверхности (стенке), которая ограничивает указанный объём.

На рис. 2.10 изображена схема рассеяния частицы отражающей поверхностью "S". Положение частицы до акта рассеяния обозначено как "A", после рассеяния — "B", условная точка соприкосновения частицы с поверхностью — "O". Углы падения " α " и отражения " β " частицы отсчитываются относительно нормали "n-O" к поверхности³. Азимутальный угол рассеяния " φ " здесь измеряется относительно плоскости падения "A-O-C" частицы, но иногда углы азимута характеризуются двумя значениями, определяемыми отдельно для плоскостей падения "A-O-C" и отражения "B-O-D". В последнем случае эти углы отсчитываются относительно некоторого фиксированного азимутального направления на поверхности "S".

¹ Например, истечение газа в окружающую среду из отверстия в баллоне, давление внутри которого превышает наружное за счёт более высокой концентрации частиц.

² В замкнутых физических системах наличие таких границ — строго обязательно.

³ Иногда эти углы обозначают буквами " θ " и " ϑ ", что менее удобно из-за их сходства.



Уже давно доказано¹, что диффузный газ будет находиться в состоянии термодинамического равновесия² с некоторой отражающей поверхностью, если угловые характеристики³ рассеиваемого газа будут соответствовать двум следующим условиям:

- Азимутальное направление рассеяния частиц — должно быть равновероятно для всех возможных значений соответствующего угла "φ" (от 0 до 2π радиан). Смысл этого условия очевиден: при его несоблюдении изотропное поле скоростей частиц диффузного газа после взаимодействия этого газа со стенкой стало бы анизотропным, что вызвало бы появление постоянно направленных потоков рассеянного газа в определённых азимутальных направлениях.
- Плотность вероятности для угла отражения "β" частиц, «покидающих» поверхность, должна быть описана точно такой же функциональной зависимостью, как и плотность вероятности для частиц, «прибывающих» на поверхность под углом падения

¹ В области оптики (закон Ламберта) — Фурье и Пуассон [35, стр. 63], в области молекулярной динамики (закон Кнудсена) — Epstein P. S., Phys. Rev., 1924, v. **23**, 710. (Имеется перевод: В книге: "Газовая динамика". — М.: ИЛ, 1950, с. 283-309); Gaede W. — Ann. d. Phys., 1913, V. **41**, 331 [32, стр. 45].

² Речь идёт как о детальном, так и о глобальном статистическом равновесии. На макроскопическом уровне эти два вида равновесия не различимы. В квантовой физике они также не различимы и на микроуровне — вследствие декларируемой идентичности тех состояний, которые отличаются лишь «взаимозаменяемой» однотипных частиц.

³ Напомним, что рассматриваются *изоэнергетические* процессы рассеяния. Поэтому релаксация импульса частицы газа сводится лишь к изменению угловой направленности вектора этого импульса, скалярная величина которого остаётся постоянной.

" α ". Необходимость этого условия опять-таки очевидна, так как в противном случае плотность прямого и обратного потоков частиц вдоль некоторых угловых направлений — перестала бы совпадать, что привело бы к нарушению изотропности свойств газа в пристеночном пространстве ввиду дисбаланса процессов переноса.

Вышеупомянутая зависимость, описывающая плотность вероятности падения (отражения) частицы как функцию соответствующей угловой характеристики, называется законом Кнудсена¹ или законом Ламберта², — в зависимости от вида изучаемой физической системы. Оба этих закона имеют абсолютно тождественную математическую форму представления и описывают идентичные параметры рассеяния³ частиц различной природы на некоторой поверхности [17, стр. 52-53, 140], [36, стр. 150].

Математическая форма закона Кнудсена (Ламберта) выглядит следующим образом:

$$\text{2D-системы: } f(\beta) = \cos(\beta) > 0 \quad \text{для } \beta \in [0, \pi/2), \quad \varphi = \text{Const}; \quad (2.1)$$

$$\text{3D-системы: } f(\beta) = \sin(2 \cdot \beta) \geq 0 \quad \text{для } \beta \in [0, \pi/2), \quad \varphi \in [0, 2 \cdot \pi). \quad (2.2)$$

где $f(\beta)$ — плотность вероятности того, что частица покидает границу двумерного (2D) или трёхмерного (3D) пространства под углом отражения $\beta \in [0, \pi/2)$.

Обычно когда говорят о законе Кнудсена или Ламберта, то, как правило, подразумевают зависимость (2.1), справедливую только при отсутствии какой-либо вариации у значения азимутального угла φ . Формула (2.1) имеет смысл, например, при рассмотрении динамики невырожденного газа электронов проводимости в полупроводниковых системах пониженной размерности (2D-системы). Если образец изготовлен в виде эпитаксиальной плёнки с толщиной, меньшей характерной длины волны де Бройля электронов, то теряют смысл любые проявления динамики (в классическом определении этого слова) частиц в направлении нормали к поверхности плёнки. В данном случае движение электронного газа в полупроводниковом образце становится двумерным. Закон Кнудсена для рассеяния частиц на боковых границах 2D-образца принимает вид:

$$f(\beta) = \frac{1}{2} \cdot \cos(\beta) \quad \text{для } \varphi_1 = \text{Const} \in (0, \pi) \quad \text{и} \quad \varphi_2 = \text{Const} + \pi. \quad (2.3)$$

Формула (2.3) отличается от зависимости (2.1) нормировочным коэффициентом $1/2$, который образуется вследствие симметричного расширения в 2D-системах диапазонов изменения угла падения α и угла отражения β в отрицательную область:

$$\alpha \in (-\pi/2, +\pi/2), \quad \beta \in (-\pi/2, +\pi/2).$$

Формула (2.2) относится к объёмному (3D) случаю равновесного рассеяния диффузного газа на стенке. Эта формула получается из выражения (2.1) после интегрально-

¹ Это название обычно применяют в молекулярной динамике или в иных случаях, когда частицы изучаемого газа имеют ненулевую массу покоя.

² Такое название используют в оптике, когда рассматривают взаимодействие потока фотонов электромагнитного излучения с какой-либо поверхностью.

³ Разумеется, данные законы могут быть применены к описанию угловых характеристик не только *рассеиваемых*, но и *испускаемых* поверхностью частиц. Здесь же в контексте излагаемой тематики рассматривается лишь случай упругого рассеяния.

го усреднения функции плотности вероятности $f(\beta)$ для любого *ненулевого* диапазона варьирования азимутальных угловых направлений φ (см. об этом подробнее на стр. 41).

Таким образом, получается, что при рассеянии частиц диффузного (т. е. полностью изотропного по своим свойствам) газа на поверхности, имеет место некоторая функциональная зависимость между угловыми характеристиками движения той или иной частицы, и вероятностью реализации для этой частицы самого акта рассеяния.

Иными словами, для каждой отдельной частицы изотропного диффузного газа существует нелинейная функциональная зависимость между *направлением* её движения и *вероятностью индукции* события квантового перехода этой частицы между различными выделенными областями её фазового μ -пространства¹. Причём даже сам вид означенной зависимости — не постоянен и определяется конкретной физической организацией рассматриваемой системы: для 2D-систем (2.3) и для 3D-систем (2.2) соответствующие трансцендентные функции выглядят различным образом.

Природа зависимостей (2.1), (2.2) и (2.3) наглядно описывается в дополнительной подглаве "Иллюстративное пояснение к законам Кнудсена и Ламберта". Для людей, хотя бы элементарно знакомых с излагаемым предметом, включение такой подглавы в настоящий документ может показаться совершенно излишним ввиду тривиальности данного вопроса. В той или иной мере это относится и к другим общеизвестным темам, казалось бы, слишком подробно здесь представленным. Однако, опыт обсуждения рабочих материалов проекта "Euler" со многими специалистами² в анализируемых областях знаний, привёл автора к неожиданному для него выводу: никакую степень детализации информации не следует считать избыточной. Искушённые читатели могут пропустить те места, которые им покажутся банальными по содержанию. В отношении же всех остальных — принятый стиль изложения вполне оправдан³.

Иллюстративное пояснение к законам Кнудсена и Ламберта

Рассмотрим объём диффузного газа, ограниченного некоторой поверхностью. Для произвольной точки "А", расположенной *внутри* данного объёма, любое угловое направление движения частиц такого газа — равновероятно по определению (см. на стр. 36 рисунок 2.11, пункт 1).

В указанную точку "А" поместим микроскопического «наблюдателя», которому ничего заранее не известно о функции распределения в системе. Тем не менее, этот «наблюдатель» по истечении некоторого времени сделает вполне предсказуемый вывод о том, что движение всех частиц газа, пролетающих в окрестности контролируемой им точки, осуществляется одинаково часто для любых угловых направлений, т. е. носит пространственно изотропный характер.

На первый взгляд может показаться, что если теперь поместить в диффузный газ какую-либо поверхность, то различные угловые направления движения частиц, сталкивающихся с этой поверхностью, также будут встречаться одинаково часто. Иначе говоря, если мы поместим точку наблюдения "А" *на указанную поверхность*, то вроде

¹ Точнее, подпространства импульсов данного μ -пространства.

² Или теми, кого обстоятельства вынудили выступить в этой роли.

³ Надеюсь, никто не обиделся.

бы, допустимо предположить, что частота соприкосновения частиц с поверхностью определяется соответственно «отсекаемой половинкой» сферически симметричного внутриобъемного распределения частиц по скоростям (см. рис. 2.11, пункт 2). Таких взглядов придерживался, например, Леонард Эйлер, именем которого и было названо описанное равновероятное угловое распределение частиц газа [35, стр. 63-65].

Вероятность обнаружения «наблюдателем» в точке "А" каких-либо частиц диффузного газа, обладающих одинаковой скалярной скоростью, но различным угловым направлением своего движения (2D-система).

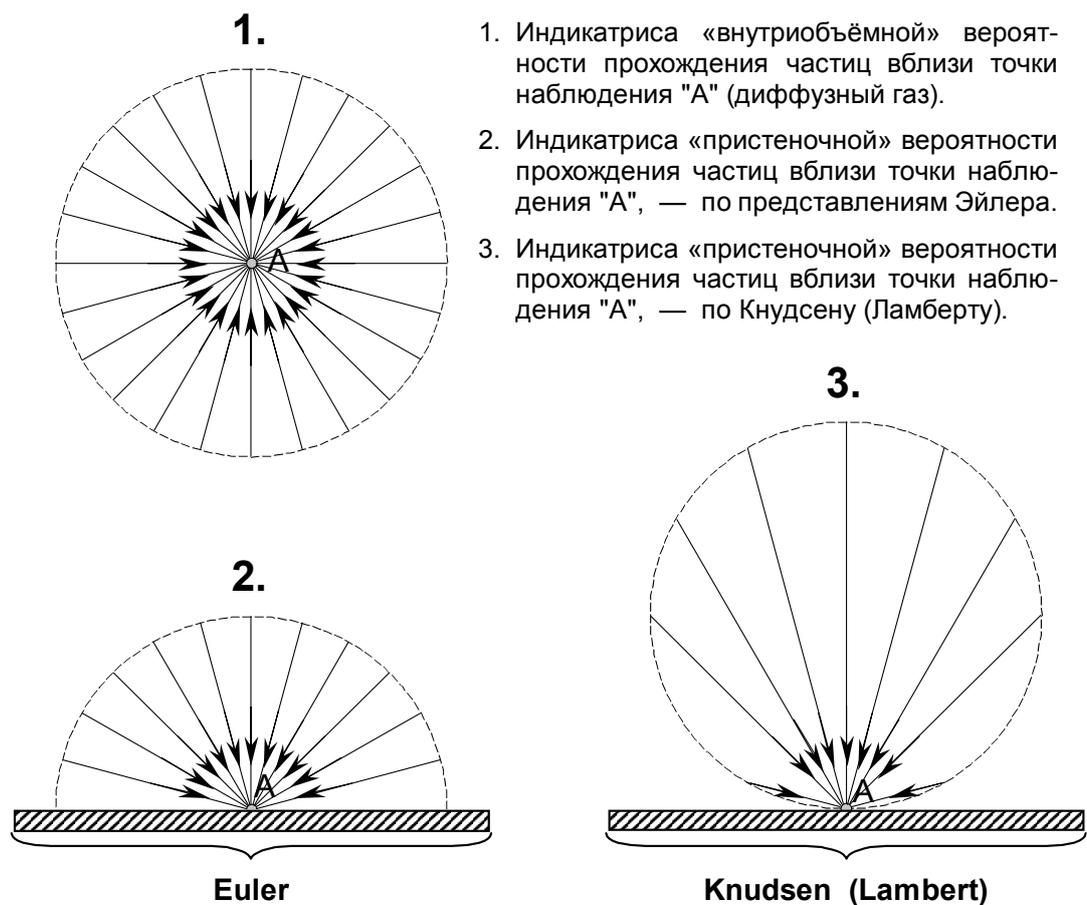


Рис. 2.11. Различные модели рассеяния частицы

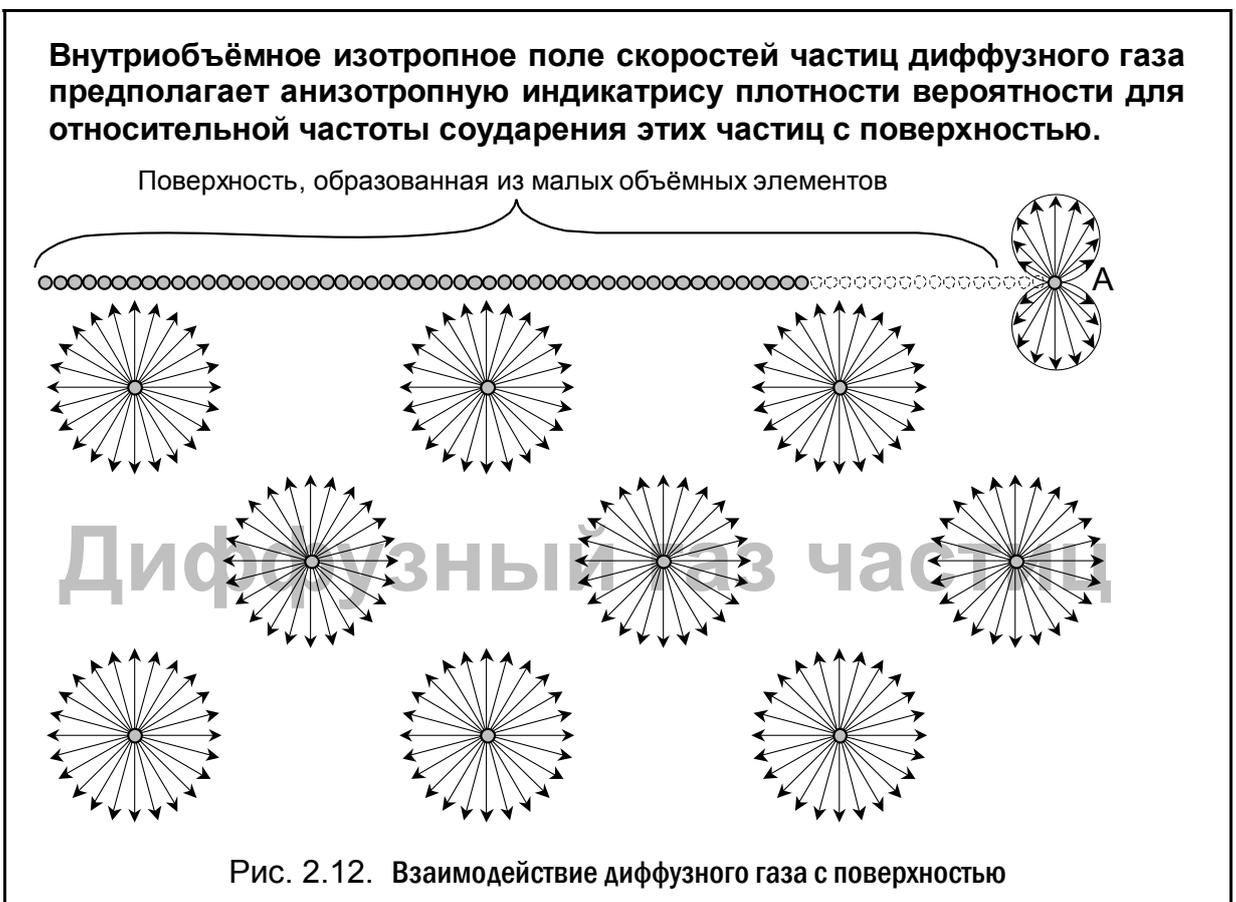
Тем не менее, очевидно, что математическое описание функции плотности вероятности, соответствующей распределению Эйлера, носит противоречивый характер. Действительно, средняя по времени вероятность взаимодействия с поверхностью любой частицы, которая движется по направлению к этой поверхности¹, по мнению Эйлера должна быть всегда одна и та же. Иначе говоря, для частиц, обладающих одинаковой скалярной скоростью (изоэнергетичность), указанная вероятность никак не зависит от

¹ Естественно, если нормальная к поверхности составляющая скорости частицы направлена так, что она удаляется от поверхности, то вероятность столкновения этой частицы с данной поверхностью — тождественно равна нулю.

угла падения той или иной частицы на поверхность. При этом получается, что если, например, угол падения частицы точно равен $\alpha = \pi/2$ radians = 90° , то частица летит параллельно поверхности, т. е. вероятность её падения на эту поверхность — равна нулю. Если же угол падения меньше значения $\alpha = 90^\circ$ на любую сколь угодно малую (но всё же большую нуля) величину $\varepsilon \rightarrow +0$, то соответствующая вероятность должна скачком (разрыв первого рода) принимать своё значение, постоянное для $\forall \alpha \in [0, \pi/2)$.

Такие особенности математического описания, которые явно противоречат каким-либо реальным свойствам моделируемых объектов, именуются как «нефизичность» соответствующей математической модели. Распределение Эйлера также является «нефизичным» по своему характеру и не может быть корректно применено для адекватного описания реальных вероятностных процессов взаимодействия частиц со стенкой.

Причиной такой «нефизичности» является то, что любая поверхность, имеющая площадь больше нуля (иначе бы она и не была поверхностью), согласно теории множеств принципиально не представима конечным множеством точек, характеризующих мерой нуль. Такого противоречия можно избежать, если на рис. 2.11 вместо точки наблюдения "А" ввести какую-либо объёмную геометрическую фигуру (например, сферу наблюдения "А") бесконечно малых (но не нулевых) размеров. В этом случае отражающая частицы поверхность должна формироваться из указанных малых объёмных элементов, непосредственно примыкающих друг к другу своими «боками». Последнее обстоятельство делает необходимым учёт взаимного экранирования данных объёмных элементов, образующих сплошную поверхность (см. рис. 2.12).



Очевидно, что эффективность такого экранирования будет определённым образом зависеть от рассматриваемых угловых направлений в пространстве: для нормальных углов падения ($\alpha = 0^\circ$) экранирование должно отсутствовать вовсе, а для скользких углов падения ($\alpha \rightarrow 90^\circ$) эффект взаимного экранирования объёмных элементов поверхности будет проявляться максимально полным образом¹.

Учёт всех вышеописанных обстоятельств позволяет получить реальную индикатрису, соответствующую плотности вероятности взаимодействия частиц диффузного газа с некоторой поверхностью, — в зависимости от углового направления движения этих частиц относительно данной поверхности. Надлежащая индикатриса, отвечающая закону Кнудсена (Ламберта), изображена на рисунке 2.11, пункт 3.

Между тем, очевидно, что вид функциональных зависимостей (2.1), (2.2) и (2.3) никак не должен зависеть от конкретных геометрических характеристик микропрофиля той поверхности, на которую падают частицы. Действительно, в самой непосредственной близости от любой (гладкой или неровной) поверхности можно поместить некоторую плоскость, параллельную соответствующему локальному участку макроскопической формы указанной поверхности. В таком случае все частицы газа, пересекающие данную плоскость, обязательно должны будут испытать соударение с реальной физической поверхностью, находящейся сразу за этой плоскостью. Обратное утверждение, разумеется, также справедливо: все частицы, падающие на физическую поверхность, должны будут предварительно пересечь плоскость, «висящую» в непосредственной близости от этой поверхности.

Таким образом, математический вывод законов Кнудсена и Ламберта можно осуществить и не рассматривая, например, трудоёмкую задачу взаимного экранирования друг другом каких-либо геометрических элементов, из которых состоит исследуемая поверхность. Вполне достаточно проанализировать вероятность пересечения частицами некоторой плоскости, помещённой внутрь объёма диффузного газа. Полученные выводы будут справедливы для любой реальной физической поверхности, имеющей определённую макроскопическую форму (совершенно не обязательно плоскую, достаточно, если плоским можно будет считать всякий локальный участок этой макроповерхности).

На рисунке 2.13 (стр. 39) изображён кубический элемент объёма диффузного газа. Проанализируем вероятность пересечения частицами газа некоторой горизонтальной плоскости, которая совпадает с нижней гранью куба. При этом допустим, что все частицы газа имеют одну и ту же скалярную скорость V_0 , а любые угловые направления движения данных частиц — реализуются одинаково часто (изотропность). Более того, только в рамках именно этой задачи временно предположим, что все векторы импульсов частиц строго компланарны, т. е. динамика газа является фактически двумерной. Тогда из вышеупомянутого свойства изотропности поля скоростей диффузного газа следует, что в любом элементе его объёма должно быть равное количество (в статистическом среднем) каждого *вида* частиц, имеющих то или иное значение² угла падения α :

¹ Например, если поверхность — бесконечная и плоская, то при $\alpha \rightarrow 90^\circ$ один-единственный объёмный элемент способен «загородить» собой сколь угодно большое число других таких элементов, «стоящих за ним» на выбранном азимутальном направлении.

² Принимаются во внимание лишь те частицы, которые имеют нормальную компоненту скорости V_{\perp} , направленную в сторону пересекаемой плоскости (нижняя грань куба).

- Частицы вида 1: $\alpha = 60^\circ$, скорость движения к стенке $V_{\perp} = \cos(\alpha) \cdot V_0 = 1/2 \cdot V_0$;
- Частицы вида 2: $\alpha = 30^\circ$, скорость движения к стенке $V_{\perp} = \cos(\alpha) \cdot V_0 = \sqrt{3}/2 \cdot V_0$;
- Частицы вида 3: $\alpha = 0^\circ$, скорость движения к стенке $V_{\perp} = \cos(\alpha) \cdot V_0 = V_0$.

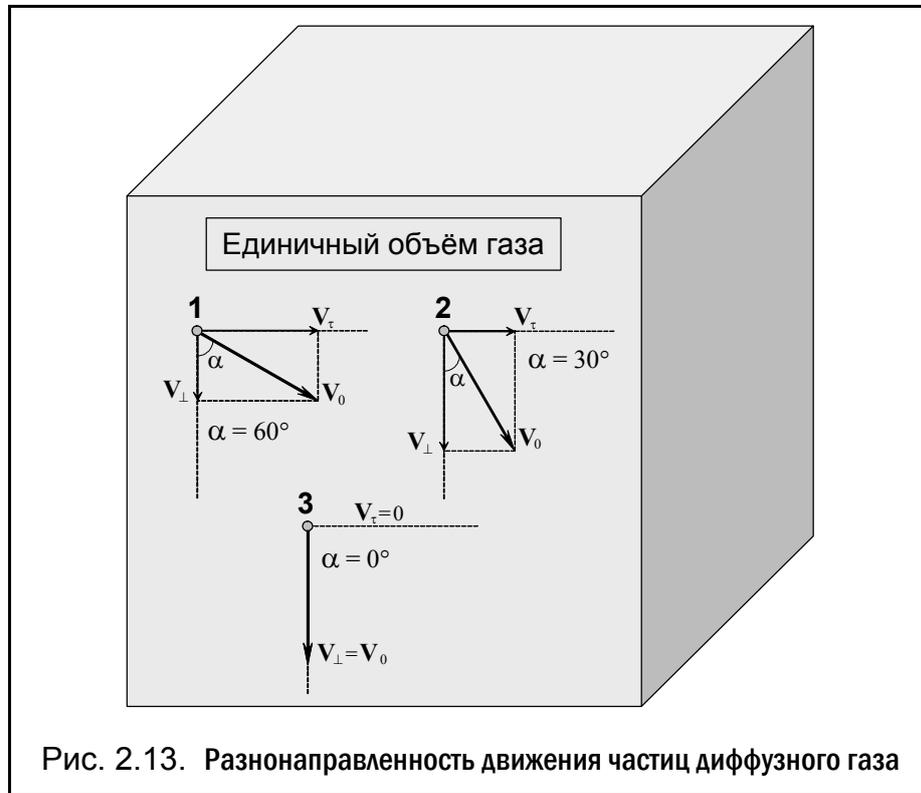


Рис. 2.13. Разнонаправленность движения частиц диффузного газа

Пристеночный объём системы как бы одновременно содержит «различные виды» газа (1, 2 и 3), которые имеют одинаковую объёмную концентрацию, но разную скорость V_{\perp} движения своих частиц в направлении стенки, определяемую надлежащими значениями угла α . Тангенциальные составляющие V_{τ} , равные параллельным стенке компонентам полной скорости V_0 , в данном случае не принимаются во внимание¹.

Оценим теперь относительные размеры объёмов газа того или иного «вида» (см. выше), которые «успевают выпасть» на одинаковую по площади S поверхность стенки за один и тот же промежуток времени Δt (см. рис. 2.14, стр. 40):

$$Volume = S \cdot h = S \cdot \Delta t \cdot V_{\perp}, \text{ где } S - \text{ площадь поверхности стенки.} \quad (2.4)$$

¹ Предполагается, что угол падения α каждой частицы, определяющий соотношение между проекциями V_{\perp} и V_{τ} , — остаётся неизменным для всего рассматриваемого промежутка времени: внутриобъёмной релаксации импульсов частиц не происходит, а их отражение от боковых стенок объёма носит зеркальный характер (если такие стенки вообще есть). Впрочем, даже если имело бы место изотропное внутриобъёмное рассеяние или, например, кнудсеновское рассеяние на боковых стенках, то это никак не изменило бы количественные пропорции между концентрациями частиц различного вида, т. е. в статистическом среднем углы падения α сохраняются всегда.

Цилиндры 1-3 содержат равные объёмные концентрации частиц газа с одинаковыми скалярными значениями полной скорости " V_0 ". Векторы этой скорости " V_0 " в каждом из случаев ориентированы определённым образом (углы падения " α "). Цилиндры имеют равновеликие по площади основания, но различные длины " h ", представляющие собой произведения единого времени наблюдения " Δt " на разные для каждого из углов " α " проекции " V_{\perp} " скорости " V_0 ".

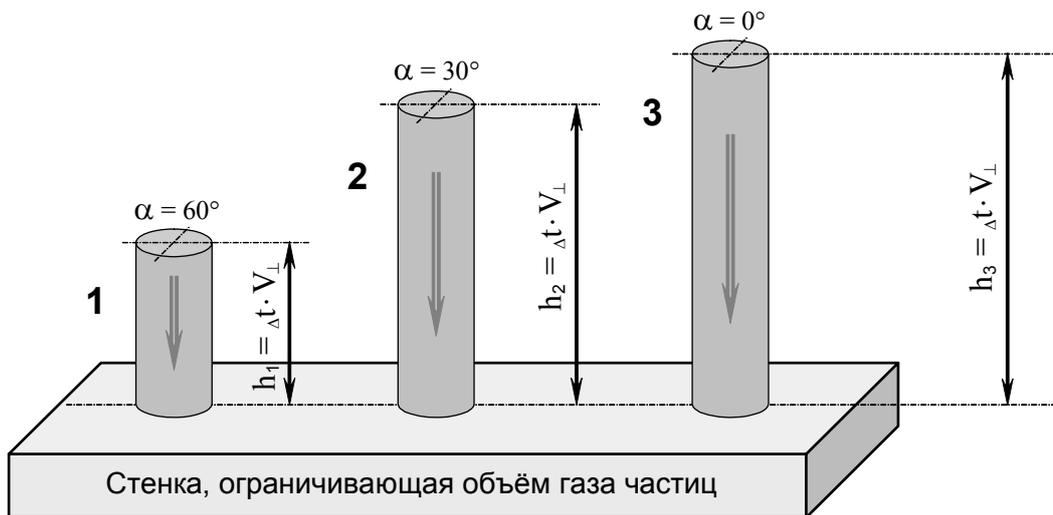


Рис. 2.14. К выводу о различной вероятности столкновения частиц со стенкой

Как уже говорилось, объёмные концентрации частиц одинаковы для каждого «вида» газа. Поэтому плотность потока частиц, достигающего поверхности стенки единичной площади за единичное время, должна быть пропорциональна косинусу угла α , зафиксированного для частиц данного «вида»:

$$Flow \sim Volume \sim h \sim V_{\perp} = \cos(\alpha) \cdot V_0, \text{ где } V_0 = Const. \quad (2.5)$$

Тем не менее, для трёхмерного (3D) объёма газа зависимость (2.5) никогда не выполняется. Действительно, при получении выражений (2.4) и (2.5) предполагалось, что векторы полной скорости V_0 всех частиц (см. рис. 2.13) являются компланарными (т. е. параллельными одной и той же плоскости), а разнонаправленность этих векторов у конкретных частиц сводится лишь к различным значениям угла α . Разумеется, для трёхмерного диффузного газа это не верно, так как в данном случае азимутальные направления тангенциальных составляющих V_{τ} различных частиц — равновероятно распределены в диапазоне возможного варьирования соответствующих углов азимута $\varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$, и, конечно же, эти направления, как правило, не совпадают друг с другом.

Автор уже обращал внимание на то, что широко распространённое (см., например, [36, стр. 150]) представление законов Кнудсена (Ламберта) в форме зависимостей (2.5) или (2.1), вообще не соответствует ситуации рассеяния диффузного газа в какой-либо реальной трёхмерной физической системе¹. Тем не менее, существует и матема-

¹ В двумерной системе соответствующая зависимость верна с точностью до постоянного нормировочного коэффициента $1/2$, — см. формулу (2.3) на стр. 34.

тически корректное выражение данного «косинусного закона», выполненное применительно к элементарной вероятности (а не плотности вероятности) падения или отражения частицы в пределах *элементарного телесного угла*, ориентированного соответствующим образом вдоль конкретного углового направления [17, стр. 52-53]. Надо сказать, что оперирование понятием элементарного телесного угла — не слишком удобно, так как при этом, в свою очередь, необходимо учитывать нелинейную зависимость¹ размера этого самого элементарного телесного угла $d\theta$ от текущего значения угла падения α :

$$d\theta = dS/R^2, \quad dS = R^2 \cdot \sin(\alpha) \cdot d\varphi \cdot d\alpha \quad (2.6)$$

где dS — площадь элемента боковой поверхности шарового слоя радиусом R , ограниченная строго бóльшим нуля диапазоном вариации азимутальных направлений $d\varphi$.

Формула (2.2), определяющая закон Кнудсена (Ламберта) для трёхмерного случая и использующая весьма удобное понятие *плотности вероятности*, получена из базового выражения (2.5) с учётом зависимости (2.6), как нормированный к единице результат интегрирования по всем возможным азимутальным направлениям $\varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$.

Выполнимость законов Кнудсена и Ламберта в квантовых системах

Закон Кнудсена (Ламберта) предполагает, что плотность вероятности столкновений частиц диффузного газа со стенками, ограничивающими его объём, зависит от угловых направлений движения этих частиц, — см. формулы (2.2) и (2.3).

Между тем, из аксиоматики статистической физики следует, что именно такое диффузное (изотропное) состояние газа в некоторой замкнутой системе следует считать его наиболее вероятным (равновесным) состоянием, неизменным во времени². Для поверхности, погружённой в объём равновесного диффузного газа, это подразумевает необходимость обязательной взаимной компенсации³ двух встречных потоков частиц, движущихся вдоль одного и того же произвольного углового направления:

- потока частиц, прибывающих на отражающую поверхность;
- потока частиц, покидающих данную поверхность.

Иначе говоря, итоговая интегральная индикатриса рассеяния, получаемая надлежащим суммированием отдельных индикатрис рассеяния всех отражаемых от поверхности частиц диффузного газа, также должна подчиняться закону Кнудсена (Ламберта).

Как и раньше, будем считать рассматриваемый диффузный газ изоэнергетичным⁴, а взаимодействие частиц этого газа с отражающей поверхностью — упругим. Выделим в фазовом пространстве исследуемой системы макроскопические состояния, образуемые совокупностями микросостояний с одинаковыми значениями углов падения и отражения частиц газа (см. рис. 2.13 на стр. 39):

$$\left| \frac{V_{\perp}}{V_{\tau}} \right| = Const. \quad (2.7)$$

¹ Указанная зависимость хорошо видна на рисунке 2.20, стр. 55.

² С точностью до флуктуаций.

³ Указанная компенсация должна иметь место во всех точках пристеночного объёма.

⁴ Как в модели Друде, где все частицы обладают одинаковой кинетической энергией.

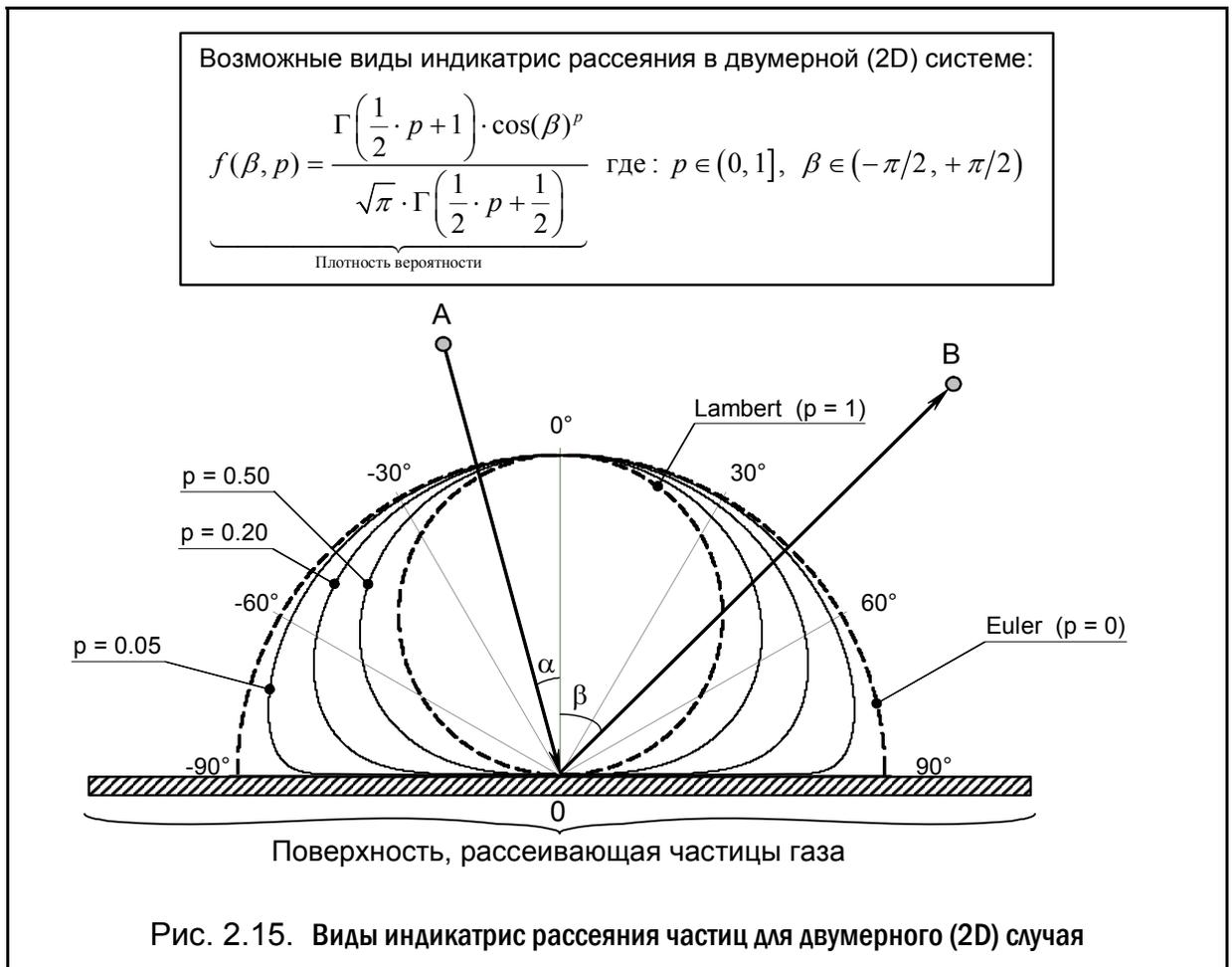
Те микросостояния, которые соответствуют *приближению* какой-либо частицы¹ к поверхности под углом падения α , а также микросостояния, соответствующие *удалению* этой частицы от поверхности под углом отражения β , считаются принадлежащими к одному и тому же макроскопическому состоянию, если они характеризуются единым угловым направлением: $\theta = \alpha = \beta$.

При зеркальном отражении от стенок — частицы не покидают своего текущего макросостояния, поскольку в этом случае обязано выполняться требование:

$$\text{Для } \alpha, \beta \in [0, \pi/2) \quad \begin{cases} \mathbf{M}(\beta|\alpha) = \alpha \\ \mathbf{D}(\beta|\alpha) \rightarrow +0 \end{cases} \quad (2.8)$$

где $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ — условное математическое ожидание угла отражения β при заданном значении угла падения α ; $\mathbf{D}(\beta|\alpha)$ — аналогичная условная дисперсия угла β .

Таким образом, если дисперсия угла отражения β не равна нулю, то, в результате рассеяния на стенках, частицы могут переходить из одного выделенного макроскопического состояния в другое. Это видно из графиков индикатрис на рисунке 2.15:



¹ Напомним, что идеальный газ может быть представлен в виде множества одночастичных систем, каждая из которых пребывает в собственном фазовом μ -пространстве.

На приведённом рисунке в результате падения некоторой частицы на поверхность осуществляется её переход из микросостояния "А" в микросостояние "В". Причём вследствие незеркального по своему характеру рассеяния, угол падения α отличается от угла отражения β : $\alpha < \beta$. Как уже говорилось, статистически усреднённые¹ вероятности переходов вида $A \rightarrow B$ и вида $B \rightarrow A$ — равны между собой [51, стр. 136-137]:

“Применительно к процессам столкновений операция обращения времени означает смену ролей сталкивающихся и разлетающихся частиц. Поэтому предположение об инвариантности относительно обращения времени [*T-инвариантность* – В. С.] приводит к соотношениям между вероятностями прямых и обратных процессов, известным как “принцип детального равновесия”.

Но равновероятность прямых и обратных переходов указанного вида отнюдь не означает того, что в диффузном газе, контактирующем с рассеивающей стенкой, будет иметь место равная по времени вероятность прямого и обратного переходов между любой парой макроскопических состояний, выделенных в фазовом пространстве на основании признака (2.7). Дело в том, что процедура обращения во времени при рассмотрении переходов вида $A \rightarrow B$ и вида $B \rightarrow A$ предполагает сохранение кратности состояний "А" и "В". Применительно к макроскопической ситуации это подразумевает равновероятность (в единицу времени) индуцирования событий переходов (столкновений со стенкой) для любых потоков частиц, — вне зависимости от угла их падения на рассеивающую поверхность. Данная равновероятность реализуется в том случае, когда плотность вероятности падающих на поверхность частиц подчиняется распределению Эйлера. Для 2D-системы такая функция плотности вероятности выглядит следующим образом:

$$\underbrace{f(\alpha) = \frac{1}{\pi}}_{\text{Euler}} = \text{Const}, \text{ где } \alpha \in (-\pi/2, +\pi/2). \quad (2.9)$$

На рисунке 2.15 видно, что изображённый в полярных координатах график функции распределения по Эйлеру (2.9) разительно отличается от графика, описывающего распределение Ламберта² (2.3). Вместе с тем именно только распределение Ламберта и соответствует равновесному состоянию диффузного газа, контактирующего со стенкой.

Ещё раз обратим внимание на ситуацию, представленную на рис. 2.15. Пусть, например, из состояния "А" на рассеивающую поверхность под углом α непрерывным потоком (в виде коллимированного пучка) падают частицы. Все эти частицы упруго отражаются от стенки в окружающее пространство, причём какая-то их доля будет рассеяна под углом β , т. е. в состояние "В". Абсолютно очевидно, что в данной ситуации будет происходить постоянная и однонаправленная «перекачка» частиц по маршруту "А-0-В" из макросостояния, характеризуемого углом α , в макросостояние, определяемое углом β . Обратный же поток частиц (маршрут "В-0-А") — *отсутствует*

¹ Такое усреднение по начальным и конечным состояниям необходимо лишь для квантовых систем. Для случая классической динамики оно, вообще говоря, не требуется.

² Поскольку понятие «распределение Эйлера» было введено применительно к оптическим явлениям, то здесь в качестве автора «оптического варианта» косинусного закона рассеяния [17, стр. 27-29, 52-53, 140] упоминается именно Ламберт, а не Кнудсен.

полностью, поскольку кратность числа частиц, которые могли бы участвовать в процессе обратного перехода вида $B \rightarrow A$ — равна нулю¹.

Картина качественно не меняется и в том случае, когда кратность частиц, участвующих в обратном переходе по маршруту "B-0-A", хоть как-то отличается от кратности частиц исходного маршрута "A-0-B". Действительно, поскольку вероятности исходов отдельных уже индуцированных актов рассеяния одинаковы и для прямого, и для обратного направлений, то результирующий перенос частиц между состояниями "A" и "B" определяется исключительно соотношением кратностей самих событий соответствующих переходов как с одной, так и с другой стороны. Указанные же переходы осуществляются в результате столкновений частиц с поверхностью. Такие события индуцируются одинаково часто для всех частиц газа, подчиняющегося распределению Эйлера, но с различной вероятностью для частиц диффузного газа (распределение Ламберта). В результате макроскопические состояния, имеющие, например, высокую кратность взаимодействия с рассеивающей поверхностью, будут чаще других макросостояний «терять» свои частицы. Если же какие-либо макросостояния имеют низкую кратность взаимодействия с поверхностью, то в таких состояниях частицы будут как бы «залипать» на сравнительно продолжительный промежуток времени. Возникающие в результате процессы направленного «переброса» частиц из одних состояний в другие должны продолжаться до тех пор, пока частицы с различной угловой ориентацией импульсов будут падать на рассеивающую поверхность с различной частотой, т. е. пока статистика взаимодействующих со стенкой частиц газа хоть как-то отличается от статистики, предполагаемой распределением Эйлера.

Сравним теперь аксиоматический постулат, используемый ныне существующим аппаратом статистической физики, с тем принципом, который положен в основу вышеизложенных рассуждений:

- **Статистическая физика:** наиболее вероятное макроскопическое состояние замкнутой физической системы характеризуется тем, что данную систему с одинаковой вероятностью можно обнаружить в любом из микросостояний, совокупность которых образует указанное макроскопическое состояние. Иными словами, система пребывает в каждом доступном ей микросостоянии в среднем *одинаковое время*.
- **Предлагаемый принцип:** вероятность перехода замкнутой физической системы между двумя любыми доступными ей изоэнергетическими микросостояниями, осуществляемая в результате некоторого, безусловно имеющего место, единичного индуцированного акта, одинакова как для прямого, так и для обратного направления

¹ Здесь под *кратностью* понимается не просто *число* частиц, параметры которых можно отнести к тому или иному состоянию. Принципиально важным является то, что рассматриваемый промежуток времени *всем* этим частицам предоставляется безусловное «право выбора» каких-либо других состояний, в которые они могут перейти после рассеяния на поверхности. Так, например, количество частиц, летящих параллельно стенке ($\alpha = 90^\circ$) в удалённой от неё зоне (т. е. на расстоянии от стенки, значительно превышающем типичную длину волны де Бройля частиц), может быть весьма большим. Но поскольку вероятность взаимодействия таких частиц со стенкой равна нулю, то следует считать равной нулю и кратность всех частиц, входящих в данный поток. Поэтому существенна именно *кратность взаимодействия частиц с рассеивающей поверхностью*. Такая кратность зависит как от плотности потока частиц газа в пристеночном объёме, так и от угловой ориентации этого потока в пространстве.

этого перехода. Следует подчеркнуть, что указанная вероятность относится не к единичному *промежутку времени*, а к единичному *событию* самого акта перехода.

Постулат статистической физики, таким образом, является частным случаем¹ предлагаемого принципа. Действительно, если частоты (в единицу времени) индуцирования единичных актов как прямых, так и обратных переходов системы между некоторыми двумя макроскопическими состояниями — совпадают, то будут совпадать и *средние по времени* вероятности прямых и обратных переходов между этими макросостояниями. В данном случае систему с одинаковой вероятностью можно будет обнаружить в каждом из рассматриваемых состояний, между которыми фактически имеет место детальное равновесие. Такая ситуация реализуется, например, при релаксации импульсов частиц на каких-либо внутриобъёмных рассеивающих центрах.

Если же указанные частоты индуцирования актов переходов — не одинаковы для различных состояний, отличающихся, например, угловыми направлениями движения частиц (случай диффузного газа, рассеиваемого поверхностью), то средняя по времени вероятность перехода системы из одного состояния в другое должна зависеть от *направления* данного перехода. Это приведёт к тому, что в макроскопическом состоянии статистического равновесия система будет в среднем не одинаковое время находиться в разных доступных ей микросостояниях.

Для наглядной иллюстрации вышеизложенного приведём пример «бытового» характера. На рисунке 2.16 (стр. 46) схематически изображены шесть пространственно разделённых пронумерованных игральные столы, находящиеся, например, в зале казино. Все столы условно разделены на две группы:

- **Группа "А"** — объединяет столы с номерами 1-3.
- **Группа "В"** — объединяет столы с номерами 4-6.

По залу от одного стола к другому может свободно перемещаться некий игрок, причём время, которое он затрачивает на это передвижение — очень мало, и потому совершенно не существенно. Около каждого стола игрок останавливается для того, чтобы принять решение о дальнейшем переходе к столу с тем или иным номером. Принятие данного решения осуществляется по результатам выбрасывания игрового кубика². Если выпадающий на кубике номер совпадает с номером текущего стола, то бросок повторяется заново.

Однако имеется дополнительное условие: игрок не может осуществлять выбор своего дальнейшего маршрута (т. е. бросать кубик) *всегда* сразу после того, как он подходит к тому или иному столу. Для каждого стола существует своя конкретная временная частота выбрасывания кубика³. Будем, например, для определённости счи-

¹ Причём, весьма широко распространённым.

² Этот кубик игрок носит с собой, или на каждом столе есть свой кубик, абсолютно идентичный по своим свойствам остальным. Здесь важно лишь то, что сам процесс выбора дальнейшего маршрута движения игрока носит унифицированный характер и не зависит от того, возле какого стола данный выбор осуществляется.

³ Здесь предполагается, что *фаза* данной частоты всякий раз имеет случайное значение: бросок кубика может быть разрешён и немедленно после того, как игрок оказывается возле стола, но этот бросок может быть запрещён и на максимально возможное время, равное полному периоду указанной частоты.



тать, что, пребывая у столов группы "А" игрок может бросать кубик один раз в три минуты, а для столов группы "В" этот лимит составляет один раз в минуту.

В итоге получается, что игрок будет проводить возле трёх столов 1-3 группы "А" существенно больше времени, чем возле такого же количества столов (4-6) группы "В". Этот результат совершенно очевиден, так как, не смотря на *равновероятность исходов каждого броска* игрального кубика на любом из столов, *частота* этих бросков в группах "А" и "В" — не одинакова.

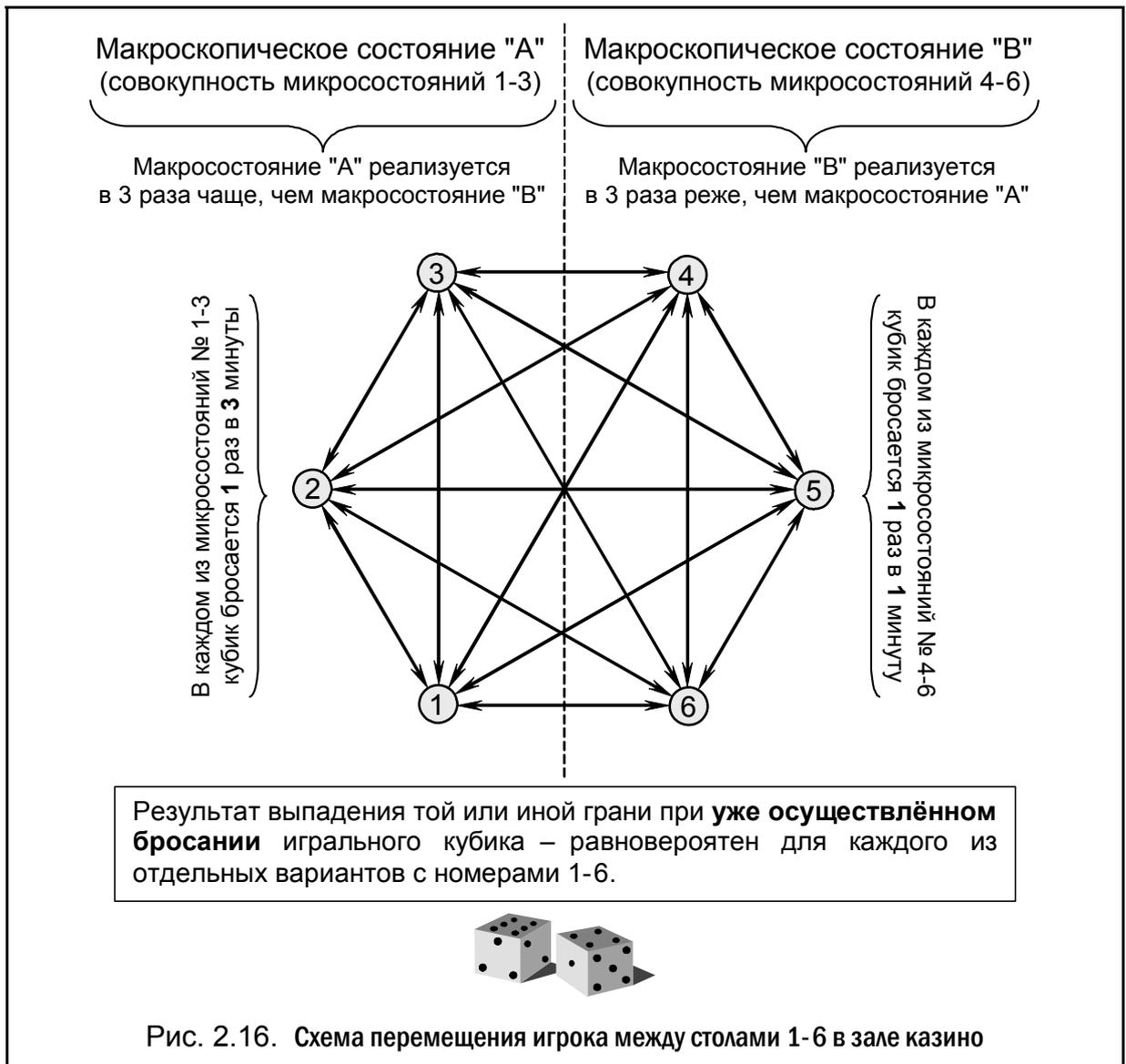


Рис. 2.16. Схема перемещения игрока между столами 1-6 в зале казино

Представим себе теперь, что рассматриваемый нами «игрок» – это физическая частица. Нахождение данного «игрока» возле какого-либо из столов символизирует пребывание одночастичной системы в том или ином микросостоянии. В таком случае образуемые совокупностями указанных микросостояний группы "А" и "В" будут соответствовать макроскопическим состояниям, характеризуемым, например, различными угловыми направлениями движения частицы в некоторой пристеночной области. Очевидно, что в описанной ситуации исход броска игрального кубика может функционально соответствовать результату релаксации импульса частицы на упомянутой стенке.



Для квантовой частицы такого рода релаксация носит индетерминированный характер. Реализуемый при этом акт индуцированного перехода между некоторым начальным и конечным микросостоянием системы — имеет равную амплитуду вероятности, как для прямого, так и для обратного направлений данного перехода (*T-инвариантность*).

Вышеприведённая аналогия имела своей целью наглядное разъяснение природы ранее предполагавшегося физического эффекта: если специально «приготовленный» диффузный газ квантовых частиц привести в контакт с упруго (но не зеркально) отражающей эти частицы стенкой, то изначально имеющее место распределение Ламберта будет с течением времени стремиться трансформироваться в распределение Эйлера.

Более подробно об условиях проявления данного эффекта можно сказать следующее. Пусть в некоторой замкнутой системе содержится газ квантовых частиц, причём объём этого газа ограничен некоторыми стенками. Физические свойства частиц газа и поверхностей стенок таковы, что частицы при их отражении от указанных поверхностей испытывают незеркальное упругое волновое рассеяние дифракционного характера. В этом случае можно утверждать, что наиболее вероятное макроскопическое состояние данного газа (состояние статистического равновесия), находящегося в кнудсеновской области какого-либо пристеночного пространства, характеризуется распределением Эйлера. При этом для всех частиц, *взаимодействующих со стенкой*, имеет место равновероятная ориентация угловой направленности векторов их импульсов (волновых *k*-векторов). Функция распределения параметров частиц *внутри объёма* рассматриваемого пристеночного пространства должна носить анизотропный характер, что не характерно для диффузного газа: движение частиц *вдоль* рассеивающей поверхности будет более вероятным, чем в направлениях, *нормальных* к данной поверхности.

На рисунке 2.17 изображено описанное макроскопическое состояние статистического равновесия газа квантовых частиц в пристеночной кнудсеновской области. Рекомендуем сравнить эту картину с той, которая была приведена на рис. 2.12, стр. 37.



При этом следует особо обратить внимание на следующее обстоятельство: если отражение от стенки испытывает газ с изначально не изотропными свойствами (например, все частицы падают на поверхность под одним и тем же углом), то для такой ситуации отклонение индикатрисы рассеяния от закона Кнудсена (Ламберта) встречается чаще, чем его соблюдение. В подтверждение данного обстоятельства приведём несколько характерных цитат из таких предметных областей, как оптика и молекулярная динамика.

В книге А. П. Иванова "Оптика рассеивающих сред" по поводу границ применимости закона Ламберта говорится следующее [21, страницы 34, 125-126, 130, 140]:

“Учёт границы раздела рассеивающей среды является трудной задачей теории переноса. В этом направлении делаются некоторые попытки ... Однако в них используются такие идеализации, как независимость отражения поверхности от условий освещения, рассеяние с постоянной яркостью под любым углом (закон Ламберта), зеркальность границы раздела и т. д., что не соответствует реальности на основании многочисленных исследований.

В практической деятельности считается, что различные белые материалы, используемые как эталоны, отражают свет по закону Ламберта, т. е. имеют постоянную яркость во всех направлениях. Анализ параметра h позволит нам ответить, насколько это допущение правомочно¹.

На рисунке ... представлена зависимость h от η для различных сред в случае нормального падения облучающего пучка, полученная на основании теоретических и экспериментальных данных². Видно, что даже при сферической индикатрисе рассеяния³ и отсутствии поглощения в среде угловое распределение отражённого излучения не описывается законом Ламберта. Отступления от него наиболее существенны при косых углах наблюдения⁴.

Полученные результаты по параметру h показывают, что закон Ламберта для реальных объектов имеет место только в весьма ограниченной области углов рассеяния и его использование в практических задачах во многих случаях приводит к значительным неточностям.

¹ Параметр h является здесь коэффициентом яркости бесконечно толстого непоглощающего слоя – В. С.

² Параметром η обозначен косинус угла наблюдения поверхности – В. С.

³ Имеется в виду диффузный характер *внутриобъёмного* излучения – В. С.

⁴ Именно при таких углах наблюдения чаще всего проявляется дифракционный характер рассеяния квантовых частиц на неровной поверхности (при этом, как правило, масштаб разброса высот микрорельефа данной поверхности сопоставим по порядку величины с длиной нормальных к ней составляющих волн де Бройля частиц) – В. С.

.....
Во всех случаях распределение [отражённого] света не подчиняется закону Ламберта”.

В книге Д. В. Сивухина "Общий курс физики. Оптика" о законе Ламберта можно прочесть следующее [36, стр. 150]:

"Однородный светящийся шар, подчиняющийся закону Ламберта, кажется одинаково ярким в середине и по краям. Такие наблюдения и привели Ламберта к формулировке своего закона. В действительности от закона Ламберта наблюдаются большие отступления.

[В дальнейшем] ... будет показано, что при температурном излучении поверхность непрозрачного тела излучала бы по закону Ламберта, если бы коэффициент отражения света от этой поверхности для каждой длины волны не зависел от угла падения. Для гладких поверхностей, отражающих зеркально, это условие не выполняется. Но для матовых поверхностей, отражающих диффузно, оно может выполняться с той или иной степенью приближения. Для таких поверхностей при температурном излучении приближённо соблюдается закон Ламберта. Он строго справедлив при температурном излучении абсолютно чёрного тела. Матовые поверхности, например освещённая белая поверхность тела, покрытая окисью магния, или наружная поверхность колпака из хорошего молочного стекла, освещённого изнутри, являются источниками, довольно хорошо подчиняющимися закону Ламберта. Однако к этим случаям вывод закона Ламберта ... неприменим, так как в них речь идёт не о самосветящихся телах и температурном излучении, а о телах, рассеивающих свет от посторонних источников”.

Применительно к молекулярной динамике приводится типичная цитата из книги Ф. Гудмана и Г. Вахмана "Динамика рассеяния газа поверхностью" [17, стр. 27-29]:

“Одной из первых экспериментальных работ, давших информацию о динамике рассеяния газов поверхностями, была работа Кундта и Варбурга [1]¹, цель которой состояла в проверке теоретического вывода Максвелла [2] о том, что вязкость газа при постоянной температуре не зависит от плотности. На основе экспериментальных данных [1, 3] Максвелл [4] пришёл к заключению, что взаимодействие между газом и поверхностью на их общей границе раздела может быть «неполным» в том смысле, что средняя тангенциальная компонента скорости рассеянных молекул относительно рассеивающей поверхности может быть отлична от нуля. В связи с этим появилось несколько близких определений величины, которую Кнудсен [5] назвал «коэффициентом аккомодации». Согласно Кнудсену, коэффициент аккомодации α есть мера эффективности энергообмена на поверхности раздела между газом и твёрдым телом при различных температурах.

¹ Здесь и до конца текущей цитаты даны указатели на собственные первоисточники цитируемого документа. Перечень этих первоисточников приведён ниже – В. С.

Первые измерения α были выполнены Кнудсеном [5] и Смолуховским [6]. Кнудсен также впервые провёл наблюдения [7] пространственного распределения потока молекул, рассеянных поверхностью, для проверки своей гипотезы о том, что косинусный закон рассеяния применим к системам, где набегающий газ и рассеивающая поверхность не находятся в термодинамическом равновесии друг с другом. Косинусное рассеяние в условиях термодинамического равновесия было доказано ещё раньше Геде [8], а затем и другими [9, 10] на основе второго закона термодинамики. Гипотеза Кнудсена была подтверждена в экспериментах [7, 11, 12] по рассеянию атомных струй паров металла на поверхностях стекла и щелочных галогенидов. Лангмюр в то время считал такое поведение неравновесных систем дополнительным подтверждением своего вывода, основанного на собственных экспериментах [13] и состоящего в том, что молекулы газа рассеиваются поверхностью лишь после того, как адсорбируются на ней. Этот взгляд означает, что гипотеза Кнудсена выполняется постольку, поскольку $\alpha = 1$; однако Кнудсен получал в экспериментах значения $\alpha < 1$ и определённо [5] распространял свою гипотезу косинусного рассеяния и на такие случаи. После работ Кнудсена, Лангмюра и других [11, 14, 15] представление об универсальности косинусного закона для всех систем газ - поверхность господствовало, не встречая возражений, вплоть до 1928 г., когда появились сообщения о зеркальном отражении молекулярных пучков [16, 17]

.....

- [1] Kundt A., Warburg E. – Pogg. Ann. der Phys. und Chemie, 1875, B. 155, 337, 525; 1876, B. 157, 353; Phil. Mag., 1875, v. 50, 53.
- [2] Maxwell J. C. – Phil. Mag., 1860, v. 19, 20.
- [3] Другие материалы, представляющие исторический интерес, см. в работах: Meyer O. E. – Pogg. Ann. der Phys. und Chemie, 1865, B. 125, 564; 1871, B. 143, 14; Crookes W. – Phil. Trans. Roy. Soc., 1881, 387; Warburg E., Babo C. – Wied. Ann., 1873, 203.
- [4] Maxwell J. C. – In: The scientific papers of James Clerk Maxwell (Niven W. D., ed.), v. 2 – New York: Dover, 1952, p. 706.
- [5] Knudsen M. The kinetic theory of gases. – London: Methuen, 1934; см. также Ann. Phys., 1910, B. 32, 809; 1911, B. 34, 593; 1930, B. 6, 129.
- [6] Smoluchowski M. S. – Wied. Ann., 1898, B. 64, 101; Phil. Mag., 1898, v. 46, 192; Ann. Phys., 1911, B. 35, 983.
- [7] Knudsen M. – Ann. Phys., 1915, B. 48, 1113; 1909, B. 28, 999.
- [8] Gaede W. – Ann. d. Phys., 1913, B. 41, 331.
- [9] Epstein P. S. – Phys. Rev., 1924, v. 23, 710. [Имеется перевод: В книге: Газовая динамика. – М.: ИЛ, 1950, с. 283-309].
- [10] Clausing P. – Ann. Phys., 1930, B. 4, 533.
- [11] Wood R. W. – Phil. Mag., 1913, v. 30, 300.

- [12] Taylor J. B. – Phys. Rev., 1930, v. 35, 375.
- [13] Langmuir I. – Phys. Rev., 1916, v. 8, 149; J. Amer. Chem. Soc., 1918, v. 40, 1361; Trans. Faraday Soc., 1921, v. 17, 111.
- [14] Wood R. W. – Phil. Mag., 1916, v. 32, 364.
- [15] Blankenstein E. – Phys. Rev., 1923, v. 22, 582.
- [16] Johnson T. H. – J. Franklin Inst., 1928, v. 206, 308.
- [17] Ellett A., Olson H. F. – Phys. Rev., 1928, v. 31, 643".

Таким образом, отклонение от закона Ламберта — это общеизвестный факт, который сам по себе ещё отнюдь не означает нарушения аксиоматической гипотезы статистической физики о равновероятности всех микросостояний, доступных замкнутой равновесной системе.

Для иллюстрации данного утверждения можно, например, рассмотреть случай *зеркального* отражения. В этой ситуации не изотропный световой поток, падающий на поверхность под некоторым определённым углом, не подвергается какому-либо рассеянию вообще и рассеянию по закону Ламберта в частности: параметры отражённого потока строго детерминированы и определяются параметрами падающего потока. Однако если зеркальное отражение испытывает контактирующее со стенкой *диффузное* электромагнитное излучение, то рассеянный поток также будет обладать диффузными свойствами, что в итоге исключает какие-либо отклонения от закона Ламберта. Поэтому реальный интерес с точки зрения проверки высказанных в настоящей главе предположений представляет анализ интегральной индикатрисы волнового рассеяния именно *изотропного диффузного* излучения (см. Техническое задание на стр. 161).

Интересно, что упомянутые отклонения от закона Ламберта имеют тенденцию изменения углового распределения рассеяния именно «в направлении» закона Эйлера. Ниже приведена типичная для этой тематики цитата из книги Р. А. Сапожникова "Теоретическая фотометрия" [35, стр. 62-65]:

"... поверхности рассматриваемой системы, находящейся в термодинамическом равновесии, являются равнояркими. Их излучение характеризуется индикатрисой

$$f(\vartheta) = \cos(\vartheta),$$

а каждый элемент может быть заменён косинусным точечным источником¹.

.....

¹ Нетрудно показать, что данная формулировка противоречит теореме взаимности из области волновой оптики [52, стр. 39]. Указанная теорема останется справедливой для суперпозиции множества точечных источников, образующих излучающую поверхность, если каждый отдельный источник будет обладать сферически симметричной индикатрисой излучения, «не экранируемой» другими источниками (для *точечных* источников такое отсутствие экранирования — возможно). Но тогда излучение *всей* поверхности должно описываться законом Эйлера, а не Ламберта. Впрочем, в настоящей работе уже обсуждался заведомо не корректный характер представления какой-либо поверхности с ненулевой площадью любым множеством точек меры нуль.

[Приведённая формула выражает] закон Ламберта, вывод которого из условий термодинамического равновесия дал Фурье и подробно исследовал Пуассон. Из предыдущего следует, что по этому закону излучает твёрдое тело. Во многих других случаях закон Ламберта соблюдается с большей или меньшей точностью, часто достаточной, однако, для практических расчётов. Это относится как к первичным источникам, так и к вторичным. Сам Ламберт нашёл свой закон из наблюдений, показывавших, как он полагал, что яркость солнечного диска, т. е. проекции светящегося шара, одинакова во всех его точках, чем опровергалось мнение Эйлера, полагавшего, что элемент поверхности такого шара даёт силу света, одинаковую по всем направлениям. Однако ещё наблюдения Бугера показали, что предположения, принятые Эйлером и впоследствии Ламбертом, не подтверждаются для небесных тел, для которых соотношение, названное в дальнейшем законом Ламберта, является лишь не всегда допустимым приближением.

В действительности, как заметил ещё Дж. Гершель, излучает не элемент поверхности, а слой вещества, находящийся за ним. В случаях сильного поглощения собственного излучения или большой толщи излучающего вещества элемент поверхности источника излучает приблизительно по закону Ламберта, при слабом же поглощении – приблизительно так, как считал Эйлер. Отступления от этих законов зависят от преломления, отражения и рассеяния на поверхности раздела излучающей и окружающей сред. Поскольку поглощение зависит от длины волны, элемент поверхности может излучать по-разному в разных местах спектра. Газоразрядные лампы низкого давления, например, приближаются к закону Ламберта в резонансном излучении, тогда как распределение потока других линий их спектра происходит приблизительно по Эйлеру.

Таким образом, наряду с законом Ламберта в некоторых случаях применим закон Эйлера, когда элемент поверхности, излучающей по одну сторону, имеет индикатрису

$$f(\vartheta) \equiv 1$$

и эквивалентный телесный угол

$$\Omega = 2 \cdot \pi .$$

Оба закона применимы при ограниченных условиях, а не универсальны, как полагал Эйлер для своего закона и Ламберт для своего. Их обобщение позволяет получить формулу, которую в 1895 г. предложил французский учёный Блондель: индикатриса элемента излучающей поверхности может быть представлена в виде

$$f(\vartheta) = \cos(\vartheta)^m, \quad m \geq 0 .$$

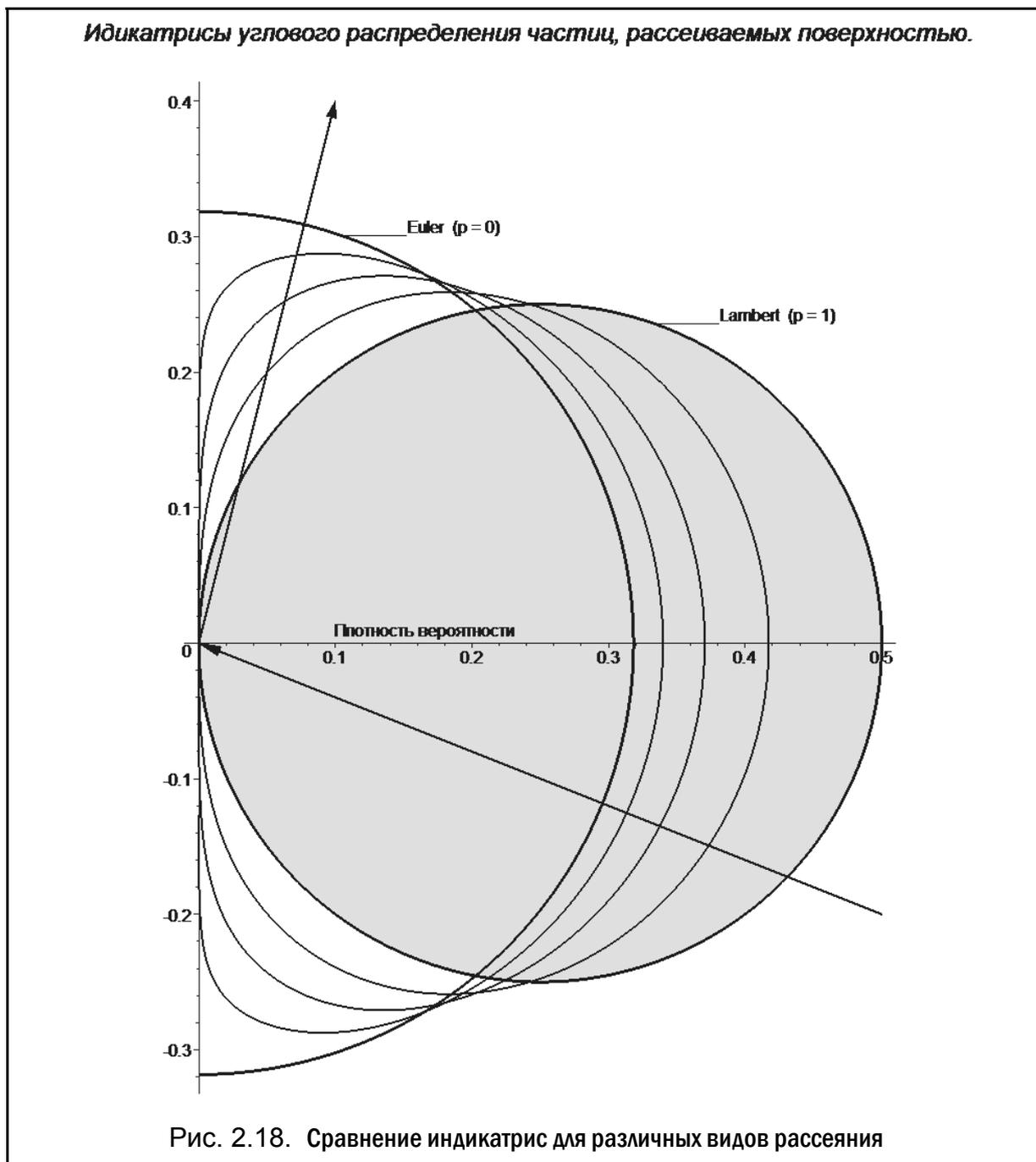
При этом ... эквивалентный телесный угол

$$\Omega = \frac{2 \cdot \pi}{m + 1} .$$

Закон Эйлера получается отсюда при $m = 0$, закон Ламберта – при $m = 1$.

По сугубо техническим причинам в настоящей работе показатель степени в формуле Блонделя обозначается не буквой "m", а буквой "p" (это видно на рисунке 2.15, приведённом ранее на стр. 42).

Ниже на рисунке 2.18 дано графическое изображение индикатрис, соответствующих законам Эйлера, Ламберта, а также трём индикатрисам промежуточных распределений, характеризуемых (по Блонделю) значениями параметра "p": $p = 0.10, 0.25, 0.50$:



В отличие от рис. 2.15, который был выполнен в системе "MathCAD® 2000 PRO", созданные с помощью пакета "Maple® 8" индикатрисы на рис. 2.18 имеют реальный взаимный масштаб, определяемый требованиями нормировки плотности вероятности.

Всё ранее сказанное ещё раз подтверждает то, что если специально «приготовленный» диффузный газ квантовых частиц привести в контакт с упруго (но не зеркально) отражающей эти частицы стенкой, то изначально имеющее место распределение Кнудсена (Ламберта) для *падающих* на стенку частиц — будет с течением времени стремиться трансформироваться¹ в распределение Эйлера для *отражаемых* частиц.

На рисунках 2.19, 2.20 и 2.21 приведена графическая иллюстрация указанного процесса трансформации распределений для трёхмерных (3D) физических систем.

На рис. 2.19 изображена сферическая поверхность отклика, образуемая концом радиус-вектора плотности вероятности², которая соответствует *падению* частиц диффузного газа на рассеивающую плоскость при реализации закона Кнудсена (Ламберта).

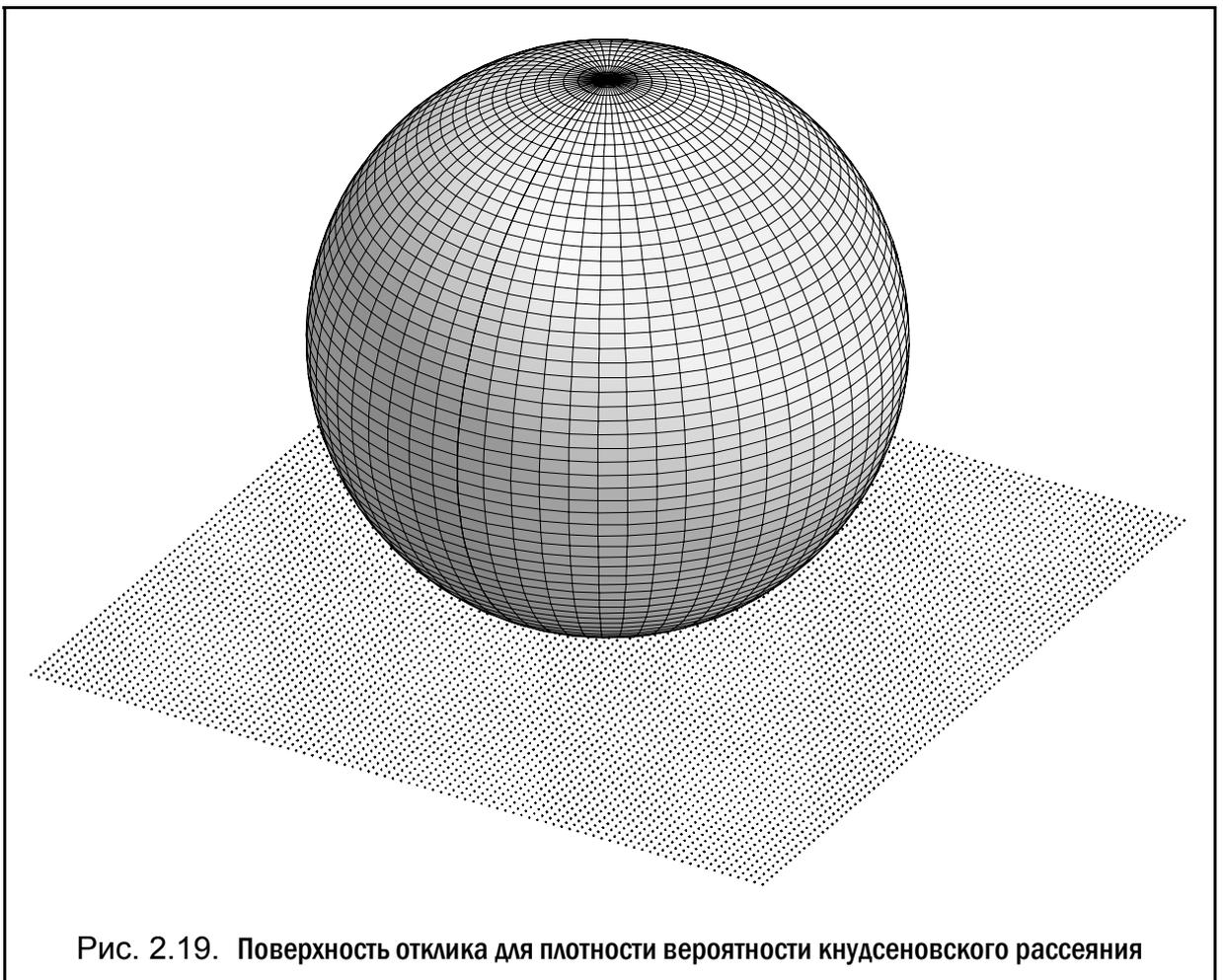


Рис. 2.19. Поверхность отклика для плотности вероятности кнудсеновского рассеяния

На рисунке 2.20 дана аналогичная поверхность отклика, соответствующая случаю *отражения* частиц по закону Эйлера:

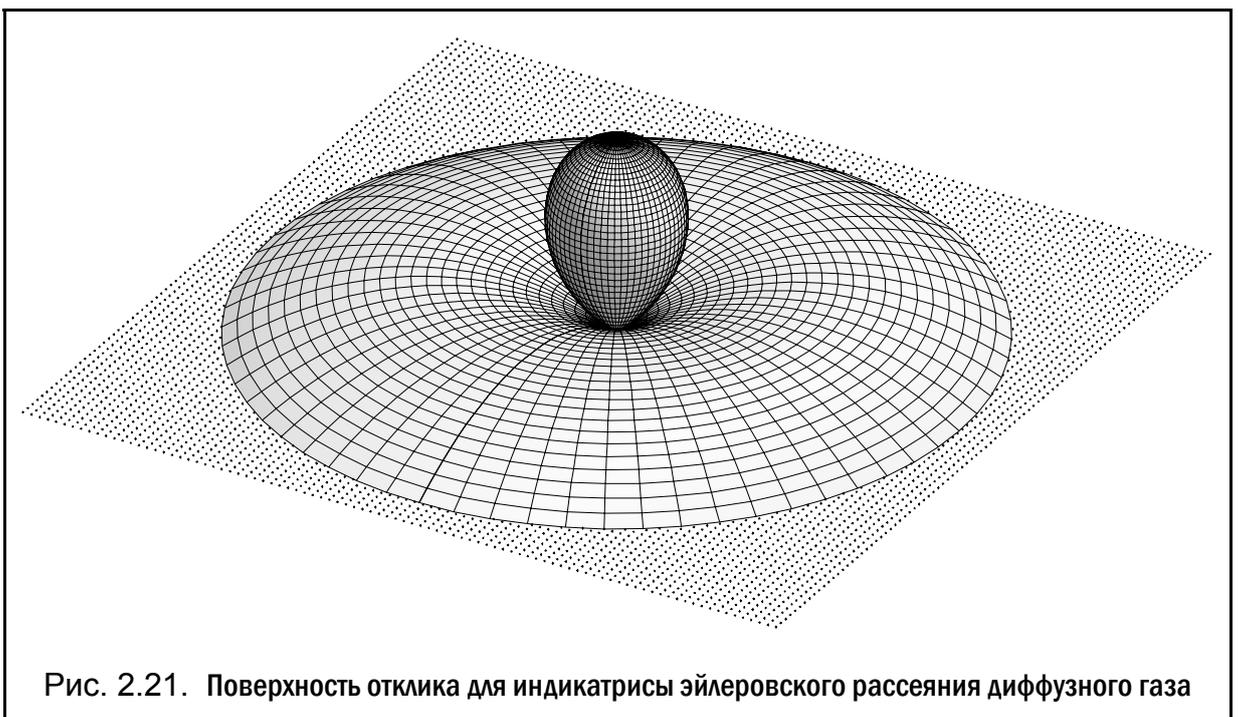
$$f(\beta) = \sin(\beta) \geq 0 \quad \text{для } \beta \in [0, \pi/2), \quad \varphi \in [0, 2 \cdot \pi). \quad (2.10)$$

¹ В той или иной степени, возможно, определяемой параметром Блонделя "p".

² См. формулу (2.2) на стр. 34 при надлежащем варьировании всех допустимых значений азимутальных углов $\varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$ и углов падения (отражения) $\alpha, \beta \in [0, \pi/2)$.



На рис. 2.21 показано, как будет выглядеть *модуль разности* распределений, графически изображённых на рис. 2.19 и 2.20. Хорошо видно, что если частицы падают на поверхность по закону Кнудсена, а отражаются от неё по закону Эйлера, то происходит перераспределение частиц в пристеночном пространстве: они как бы «откачиваются» из удалённых от стенки областей (малые углы падения) и «размазываются» в направлениях, ориентированных вдоль рассеивающей стенки (большие углы отражения).



Как уже говорилось ранее, угловые распределения движения частиц, в точности отвечающие законам Кнудсена (Ламберта) и Эйлера, в «чистом» виде практически не встречаются. Если же, например, воспользоваться для описания реальных распределений приближением Блонделя, то можно получить обобщённые зависимости плотности вероятности взаимодействия частиц с поверхностью под тем или иным углом. При этом законы Кнудсена и Эйлера представляют собой некие предельные частные случаи:

Двумерные (2D) системы

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\theta, p) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{p+1}{2}\right)} \cdot \cos(\theta)^p \geq 0, \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi = \text{Const}, p \in (0, 1]; \\ f(\theta, p)|_{p=1} = \underbrace{f(\theta) = \cos(\theta)}_{\text{Lambert}}, \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi = \text{Const}; \\ f(\theta, p)|_{p \rightarrow +0} = \underbrace{f(\theta) = \frac{2}{\pi}}_{\text{Euler}} = \text{Const}, \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi = \text{Const}. \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Трёхмерные (3D) системы

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\theta, p) = (p+1) \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\theta)^p \geq 0, \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi \in [0, 2 \cdot \pi), p \in (0, 1]; \\ \text{Lambert: } f(\theta, p)|_{p=1} = f(\theta) = \sin(2 \cdot \theta), \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi \in [0, 2 \cdot \pi); \\ \text{Euler: } f(\theta, p)|_{p \rightarrow +0} = f(\theta) = \sin(\theta), \quad \text{где } \theta \in [0, \pi/2), \varphi \in [0, 2 \cdot \pi). \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Здесь углу "θ" соответствует либо угол падения "α", либо угол отражения "β" частицы (в зависимости от контекста рассматриваемой ситуации). Азимутальные направления обозначены через угол "φ". Параметр Блонделя — представлен переменной "p".

Математический анализ физической корректности закона Кнудсена

Все теоретические результаты, ранее изложенные в настоящей работе, не предполагали полного отказа от каких-либо постулатов, используемых при модельном описании изучаемых физических систем. Такая цель, собственно, и не ставилась, так как введение достаточно правдоподобной аксиоматики в модельный аппарат той или иной научной дисциплины, как правило, вполне оправдано с методологической точки зрения (см. "Введение" на стр. 4).

Предлагаемый здесь подход подразумевает лишь *уточнение* основного аксиоматического принципа статистической физики. Данное уточнение состоит в следующем.

Понятие равновероятности прямых и обратных переходов между каждой парой микросостояний, доступных равновесной замкнутой системе, следует относить не к общей вероятности перехода в том или ином направлении за весь *диапазон времени* наблюдения, а к исходам *отдельных вынужденных событий* (актов квантовых переходов) изменения состояния системы. Если частота индуцирования указанных актов в единицу времени одинакова для прямого и обратного направлений (весьма распространённый, но не единственно возможный случай), то оба варианта вышеописанных постулативных утверждений — становятся тождественными по своему содержанию.

Следовательно, ныне существующая аксиоматика статистической физики является частным случаем предлагаемой. Само по себе это обстоятельство, конечно, выглядит положительно, поскольку преемственность такого рода почти всегда имеет место в процессе эволюционного совершенствования модельного аппарата научных дисциплин (достаточно вспомнить, например, принцип соответствия Бора [07, стр. 54, 58], [10, стр. 124-133] и др.)¹. Тем не менее, желательно иметь подтверждение правильности осуществляемого здесь подхода к анализу физических явлений, которое было бы получено вообще без применения вышеописанных аксиоматических принципов. Частичное решение этой задачи — возможно. Оно реализовано следующими двумя способами:

- Специальный математический анализ аксиоматики статистической физики.
- Исследование имитационной модели изучаемых процессов.

Имитационному моделированию посвящена отдельная глава на стр. 102. В текущей же подглаве очень кратко излагаются некоторые выводы, основанные на строго формальном (математический анализ) подходе к рассматриваемой проблеме. Подробное описание соответствующей методики, использованной при реализации вышеуказанного формального способа исследования, может быть интересно лишь ограниченному кругу специалистов. Поэтому данная информация вынесена в отдельное приложение (см. "Приложение П1: Математические свойства закона Кнудсена" на стр. 127).

Формальный анализ аксиоматики статистической физики основан на изучении «физичности» кнудсеновской (ламбертовской) индикатрисы рассеяния частиц диффузного газа на некоторой поверхности. Под «физичностью» здесь подразумевается отсутствие качественных противоречий между теми математическими свойствами, которыми всегда обязана обладать любая конкретная реализация такой индикатрисы рассеяния, и достоверно известными свойствами реальных физических систем.

Математическое описание индикатрисы осуществлено в виде нормированной к единице неотрицательной² обобщённой функции, представленной двойным рядом Фурье-Шварца [49, том 2, стр. 59-60], т. е. физическим смыслом данной индикатрисы является плотность вероятности рассеяния квантовой частицы в том или ином угловом направлении. Кроме того, изучаемую функцию отличает дополнительное требование по соблюдению закона Кнудсена в изотропной среде. Для случая взаимодействия частиц диффузного газа с некоторой поверхностью это означает, что среднестатистическая плотность вероятности движения данных частиц в произвольном угловом направлении — должна быть равна нулю в любой точке объёма пристеночного пространства.

Исследование показало, что существует бесконечное множество³ индикатрис, отвечающих вышеуказанным требованиям. Все эти индикатрисы, естественно, удовлетворяют условиям *глобального* равновесия в диффузной газовой среде, но среди них есть и такие, которые способны обеспечить *детальный* характер данного равновесия.

В качестве тестового свойства, наличие которого следует считать достоверно установленным в реальных физических системах, здесь принят так называемый «эффект

¹ Автор просит прощения за амбициозную аналогию. Однако же информация, пригодная для *скромных* параллелей, не могла сохраниться в истории науки по определению.

² Кроме, возможно, конечного множества точек (в рамках условий Дирихле).

³ Для замкнутой системы, содержащей газ квантовых частиц, указанное множество, вообще говоря, счётно (ограничено).

зеркального отражения» частиц. Имеется в виду следующее: упругое рассеяние квантовых частиц, обладающих волновыми свойствами, всегда приобретает зеркальный характер¹ при достаточно больших углах их падения на неровную поверхность (см. [17, стр. 27-29], [21, стр. 63 и 65], [50, стр. 284] и др.). Это происходит вследствие того, что проекция вектора импульса таких частиц на нормаль к указанной поверхности становится очень мала («скользящее падение»), благодаря чему сильно возрастает длина волны де Бройля, связанная с данной компонентой импульса. Если длина волны становится заметно больше вертикального масштаба микрорельефа поверхности, то частица уже «не ощущает» её неровностей, что и обеспечивает зеркальный характер отражения.

Данный эффект, экспериментально обнаруженный и теоретически обоснованный ещё в начале двадцатого века², может быть весьма наглядно проиллюстрирован, например, рисунком из книги А. П. Иванова "Оптика рассеивающих сред" [21, стр. 64]:

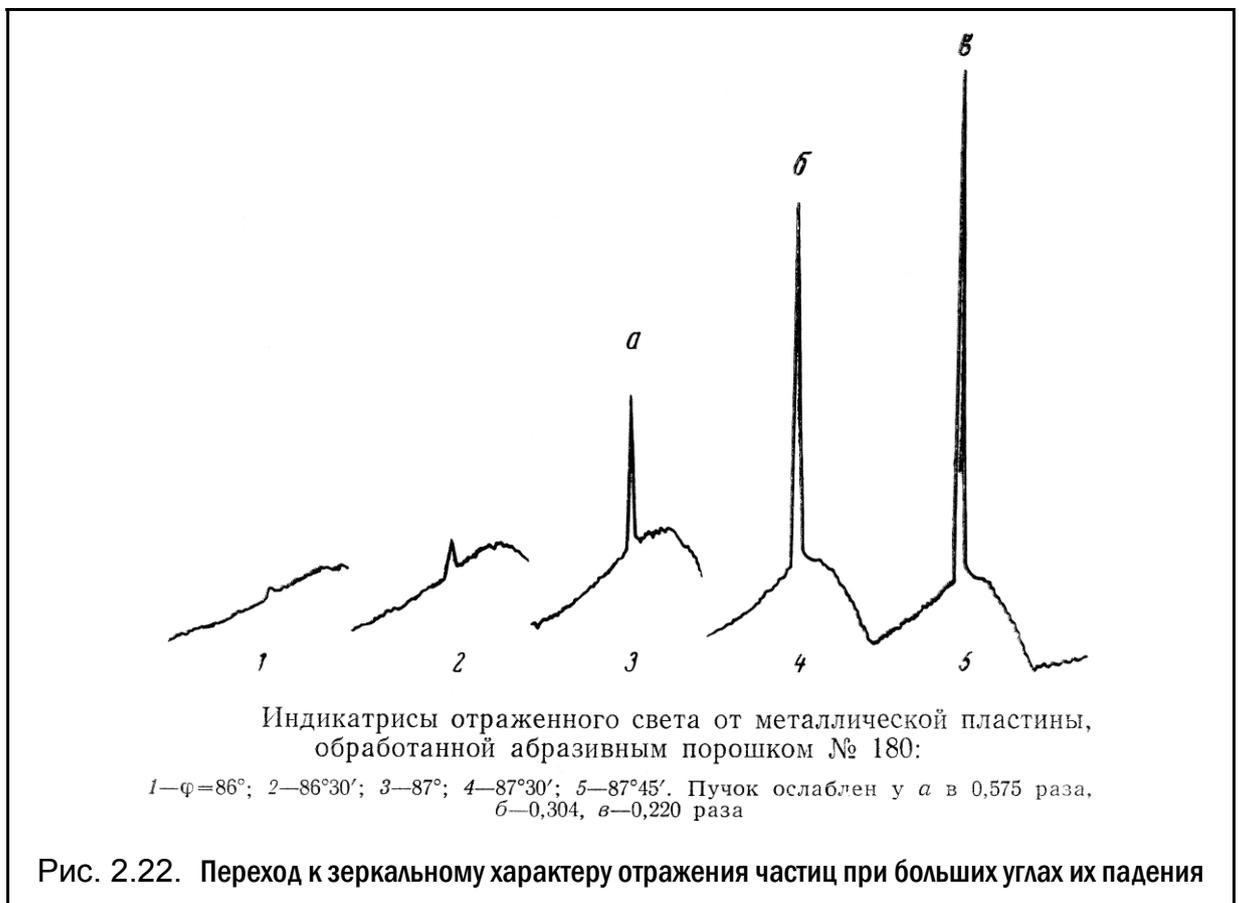


Рис. 2.22. Переход к зеркальному характеру отражения частиц при больших углах их падения

На рис. 2.22 изображён участок диаграммной ленты с индикатрисами, записанными для пяти разных углов падения излучения с длиной волны $\lambda = 0.620 \text{ мкм}$. Объектом исследования была металлическая пластина, обработанная абразивом № 180

¹ См. условие (2.8) на стр. 42, описывающее зеркальность отражения частиц от стенок.

² Впервые сообщения о так называемом «явлении зеркального отражения молекулярных пучков» появились в 1928г.:

Johnson T. H. — J. Franklin Inst., 1928, v. 206, 308;

Ellett A., Olson H. F. — Phys. Rev., 1928, v. 31, 643.

($R_z \cong 10 \text{ mkm}$). Хорошо видно, что на небольшом угловом интервале ($86^\circ - 87^\circ 45'$) относительная доля зеркальной составляющей рассеиваемого света возрастает в 294 раза.

Проводимый формальный анализ аксиоматических принципов заключался в оценке влияния выделенных групп гармоник исследуемой обобщённой функции на итоговые физические свойства индикатрисы рассеяния. В частности, решалась вариационная задача по нахождению условий достижения минимакса функционалами, особые значения которых обеспечивают зеркальный характер отражения при «скользящем» падении частиц. Один из вариантов условий такого рода может, например, выглядеть так:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \pi/2} \left\{ \int_0^{\pi/2} (\alpha - \beta)^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta \right\} = 0 \quad (2.13)$$

где $g(\beta|\alpha)$ – условная плотность вероятности (по Байесу, [25, стр. 552]) того, что частица, упавшая на поверхность под углом " α ", отразится от неё под углом " β ".

Равенство нулю интегрального функционала из левой части уравнения (2.13) равносильно одновременному выполнению обоих условий зеркальности (2.8), приведённых на стр. 42. Предельный переход вида " $\alpha \rightarrow \pi/2$ " соответствует случаю зеркального отражения частиц от поверхности при больших значениях углов падения.

Выполненный гармонический анализ показал, что «физичность» индикатрисы рассеяния, определяемая условием (2.13), может иметь место лишь при одновременном выполнении дополнительного условия следующего вида:

$$\lim_{\alpha \rightarrow +0} \left\{ \int_0^{\pi/2} (\alpha - \beta)^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta \right\} = 0 \quad (2.14)$$

Иначе говоря, соблюдение закона Кнудсена (Ламберта) в изотропной среде диффузного газа возможно только в том случае, если наряду с явлением зеркального отражения для «скользящих» ($\alpha \rightarrow \pi/2$) частиц – одновременно реализуется аналогичное зеркальное отражение и для частиц, падающих на поверхность отвесно ($\alpha \rightarrow +0$). Этот результат обусловлен необходимостью «зануления» коэффициентов Фурье для антипериодических¹ [25, стр. 233] гармоник обобщённой функции плотности вероятности (строгое доказательство — см. в Приложении П1 на стр. 127) при решении вариационной задачи, цель которой состояла в минимизации левой части уравнения вида (2.13).

Однако же, если у отражающей поверхности есть микрорельеф, геометрический масштаб которого сравним по порядку величины с длиной волн де Бройля частиц газа, то условие зеркальности (2.14) — невыполнимо, поскольку в этом случае угловая дисперсия рассеяния *отвесно* падающих на поверхность частиц заведомо не равна нулю. Условие (2.14) может быть осуществлено только тогда, когда поверхность является настолько гладкой, что зеркальное отражение от неё имеет место *даже* для нормальных углов падения² частиц ($\alpha \rightarrow +0$). Но в таком случае зеркальный характер отражения будет реализован вообще для всех частиц, имеющих любой возможный угол падения: $g(\beta|\alpha) \equiv \delta(\alpha - \beta)$ для $\forall \alpha \in [0, \pi/2)$, где $\delta(\alpha - \beta)$ – функция Дирака.

¹ Здесь имеется в виду период, равный ОДЗ углов падения и отражения: $\alpha, \beta \in [0, \pi/2)$.

² При нормальном (отвесном) падении среднее отношение вертикального масштаба неровностей поверхности к длинам волн де Бройля частиц — является максимальным по величине, в связи с чем рассеяние осуществляется наиболее интенсивно.

Таким образом, при наличии дифракции (упругого волнового рассеяния) квантовых частиц на некоторой отражающей поверхности условие зеркальности (2.13) выполняется всегда, а условие (2.14) — нет. Из этого следует вывод о принципиальной невозможности соблюдения закона Кнудсена (Ламберта) в ситуации, когда диффузный газ квантовых частиц испытывает дифракционное рассеяние на неровной поверхности.

Сказанное означает, что если приготовить замкнутую физическую систему, содержащую определённый объём диффузного газа, то взаимодействие квантовых частиц этого газа с неким дифракционным экраном — должно привести с течением времени к изменению изначально имевшегося изотропного состояния системы. Такой вывод противоречит аксиоматическому принципу статистической физики, который предполагает наличие *только одного* наиболее вероятного макросостояния в замкнутой системе, причём совершенно однозначно регламентируется даже *сам вид* указанного состояния.

Как видим, общий результат формального математического анализа кнудсеновской индикатрисы рассеяния — соответствует выводам, полученным на основании ранее предложенной формулировки уточнённого аксиоматического принципа:

- Сохранение изотропных свойств диффузного газа квантовых частиц, помещённого в объём с упруго отражающими частицы стенками, возможно только в том случае, если указанное отражение носит зеркальный характер¹.
- Если в рассматриваемой ситуации отражение частиц имеет явно выраженный дифракционный вид, то соблюдение закона Кнудсена (Ламберта) — невозможно, со всеми вытекающими из этого обстоятельства уже описанными последствиями.

Важно отметить, что один только формальный математический анализ не способен полностью исключить необходимость применения дополнительных аксиоматических принципов физического характера. Например, изложенный здесь результат математического анализа не даёт представления о предполагаемой *направленности* изменения начального (изотропного) состояния системы. Однако эта направленность становится вполне очевидной, если мы сочтём достоверным аксиоматический принцип *T-инвариантности*, являющийся частным следствием хорошо проверенной *SPT-теоремы* Паули-Людерса.



¹ Под *зеркальным* характером отражения здесь понимается не свойство равенства углов падения и отражения частиц. Для поверхности со сложным макрорельефом, представляющим собой что-то вроде «мятого зеркала», наличие такого равенства достаточно условно. Зеркальное отражение предполагает *детерминированный* характер связи между чистым состоянием частицы, падающей на конкретный участок поверхности, и состоянием этой частицы после акта рассеяния (это подразумевает нулевую дисперсию угла отражения частицы, т. е. отсутствие каких-либо явлений дифракции).

Краткое обобщение содержания главы № 2

- Если некоторая замкнутая система пребывает в своём наиболее вероятном макроскопическом состоянии, то аксиоматический принцип статистической физики постулирует равновероятность обнаружения данной системы в любом из доступных ей микросостояний. Это, в свою очередь, предполагает наличие динамического равновесия между каждой парой областей, выделенных в фазовом пространстве указанной системы: средняя *по времени* вероятность переходов системы из одной области в другую — должна быть одинаковой как для прямого, так и для обратного направления этих переходов.
- При индуцированном (вынужденном) характере элементарных переходов между микросостояниями вероятность перемещения системы из одной области фазового пространства в другую определяется не просто *длительностью времени наблюдения* за этой системой, а *числом единичных актов* соответствующих квантовых переходов, осуществлённых в течение данного интервала времени.

На рисунке 2.23 схематически изображён вид зависимости от времени плотности вероятности индуцированного перехода физической системы из состояния "А" в состояние "В". Такой переход может, например, соответствовать процессу релаксации импульса квантовой частицы на некоторой рассеивающей поверхности.

Вероятность индуцированного перехода из состояния "А" в состояние "В" определяется наличием за время наблюдения за системой Δt самого факта индукции перехода, имеющего малую временную протяжённость ε .

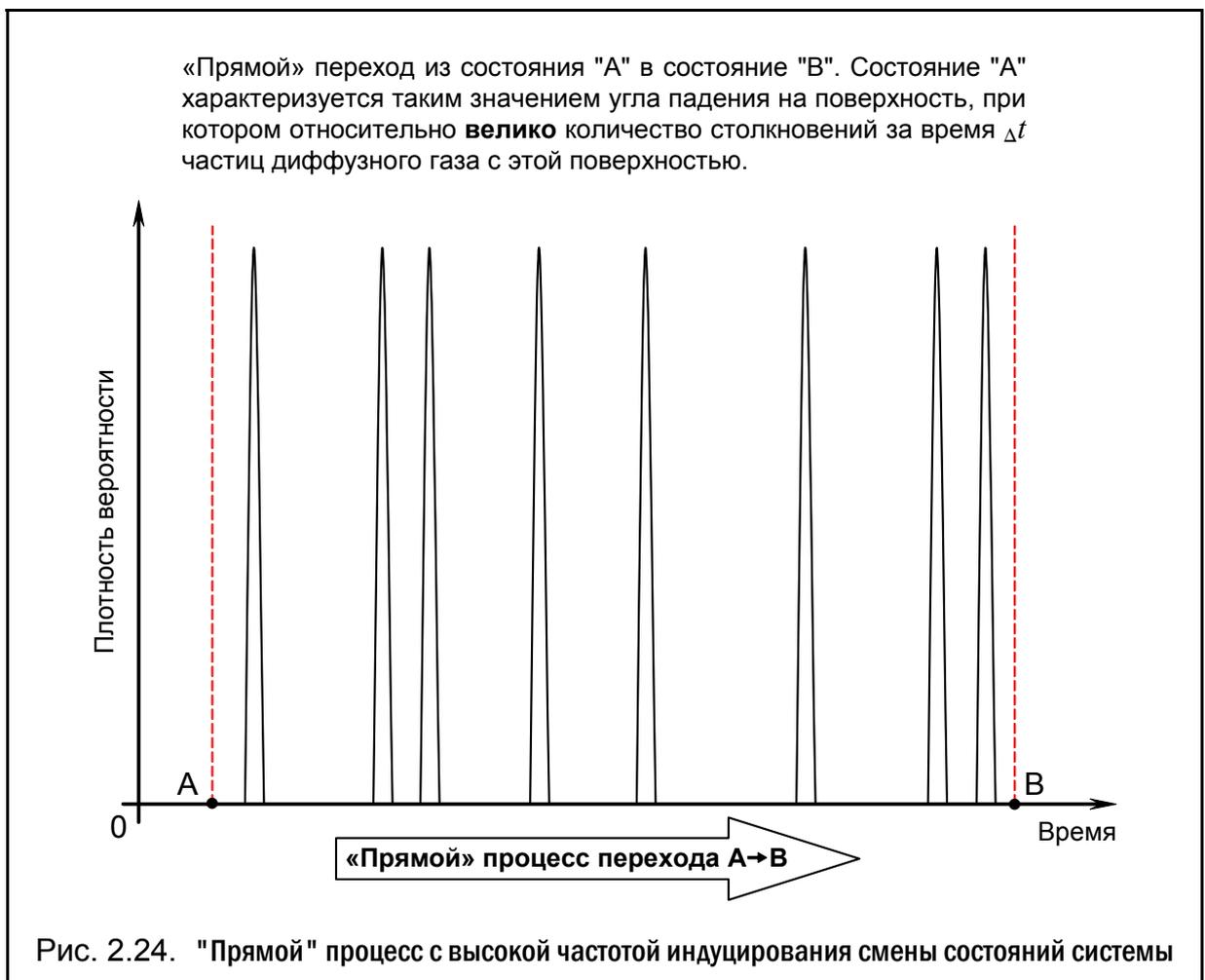
При инвертировании в системе направления времени (переход В \rightarrow А) количество актов индукции в составе диапазона Δt — не изменяется.



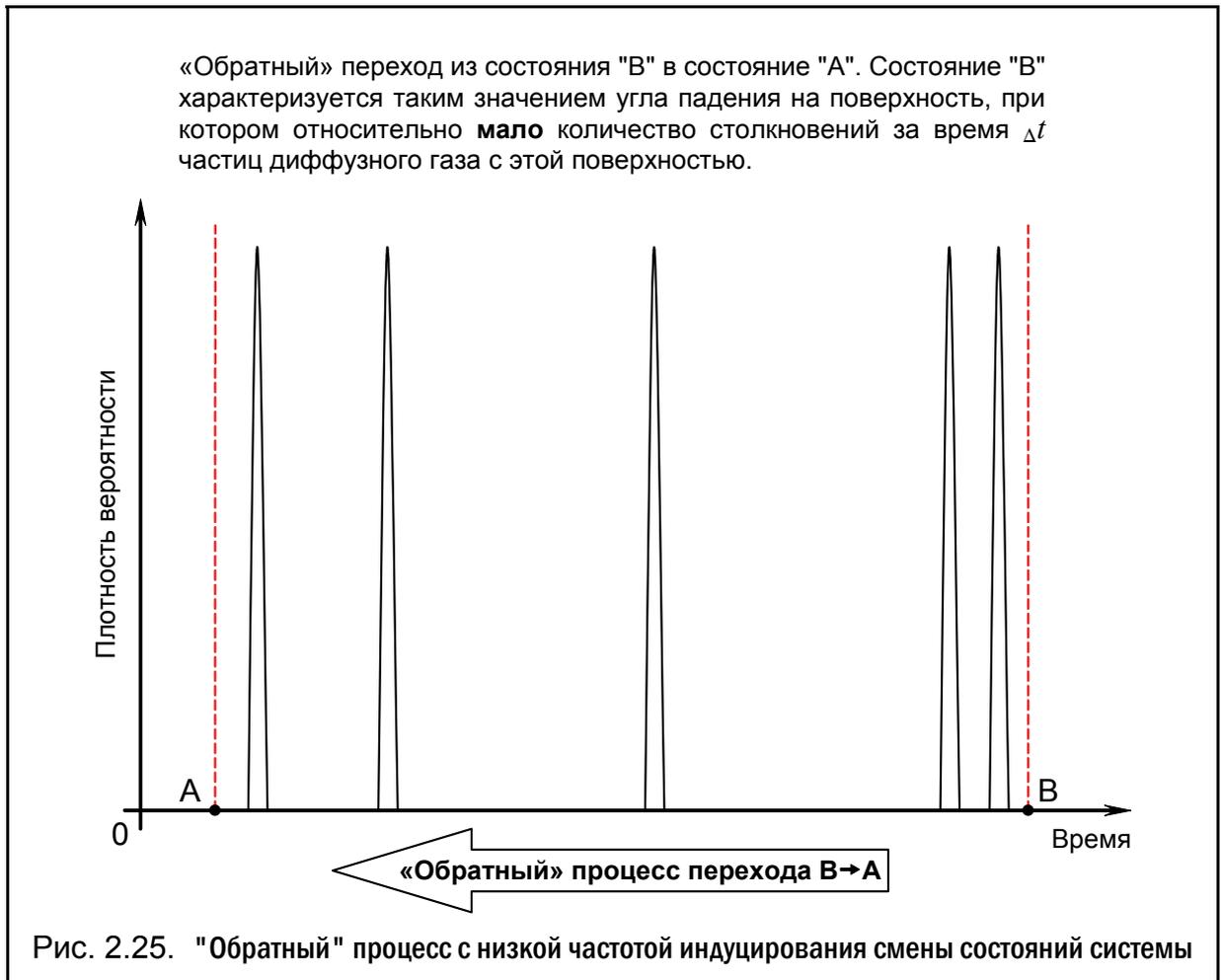
Рис. 2.23. Равновероятность смены состояний системы при инверсии знака времени

- Предполагается существование надлежащим образом организованных замкнутых физических систем, у каждой из которых наиболее вероятное (равновесное) макроскопическое состояние реализуется при неодинаковой по времени вероятности пребывания в различных доступных микросостояниях. Это может быть, например, обусловлено определённой зависимостью между угловым направлением движения частиц квантового газа, содержащегося в такой системе, и вероятностью индуцирования единичных событий квантовых переходов из одной выделенной группы микросостояний системы в другую их группу.

На рисунках 2.24 и 2.25 можно увидеть пример именно такой ситуации. Если уже упомянутая рассеивающая стенка контактирует со специально приготовленным диффузным газом квантовых частиц, то плотность вероятности взаимодействия с этой стенкой для каждой частицы — различна и определяется угловым направлением её движения в пристеночном пространстве, т. е. по закону Кнудсена.



На рисунке 2.24 изображён некий «прямой» процесс перехода из состояния "А" в состояние "В", а на рисунке 2.25 «обратный» переход из "В" в "А". Принципиальным отличием этой ситуации от случая инвертирования направления времени (см. рисунок 2.23) является то, что здесь в «прямом» и «обратном» переходах участвуют *различные* частицы, причём число частиц, участвующих за один и тот же интервал времени в переходах различного направления, может не совпадать.



- Если вышеуказанные выделенные группы микросостояний принадлежат макроскопически различным состояниям системы, то её наиболее вероятное (равновесное) макросостояние будет характеризоваться пространственной анизотропией таких физических параметров, как, например, объёмная концентрация частиц (даже при отсутствии внешних потенциальных полей). Некоторые же параметры (температура, давление и др.) будут зависеть от угловых направлений. Их корректное определение возможно лишь в тензорной (а не в скалярной, как принято сейчас) форме¹.
- Корректность предлагаемого уточнения существующих аксиоматических принципов статистической физики — была независимо подтверждена рядом специальных аналитических и численных методов (см. Главу 4 на стр. 102 и Приложение П1 на стр. 127), допускающих исследование математических моделей изучаемых явлений без привлечения какой-либо априорной аксиоматики вероятностного характера.

В следующей главе рассматриваются вопросы практической реализации тех процессов, возможность существования которых предполагается в настоящей работе.

¹ Так как температура — это параметр, характеризующий условие равновесия между частями физической системы [03, стр. 17], то понятие *тензорной* температуры может быть отнесено не только к газу, но и к элементам типа дифракционного экрана. Надо лишь учитывать, что определённая таким образом температура элемента имеет смысл только применительно к его контакту с конкретным видом газа квантовых частиц.

3. О практической реализации исследуемых процессов

Рассмотрим практические аспекты использования тех теоретических результатов, которые были изложены в предыдущих главах настоящей работы.

Значение изоэнергетических процессов для реальных систем

Весь ранее выполненный анализ вероятности переходов между различными микросостояниями физической системы относился к изоэнергетическим случаям рассеяния частиц исследуемого газа. Иначе говоря, предполагалось, что столкновение частиц с рассеивающими элементами носит упругий характер. Результатом этих столкновений является релаксация импульсов частиц, но не изменение их энергии. Применительно к описанию стохастических процессов в системе квантовых частиц¹ изоэнергетическое рассеяние такого рода представляет собой не что иное, как дифракцию.

С другой стороны, при изображении картины детального статистического равновесия (см. стр. 12) обычно принято подчёркивать, что *полная* релаксация параметров частиц равновесного газа при его стохастизации является единственно возможным вариантом поведения этого газа в равновесной замкнутой системе. Под *полной* релаксацией параметров здесь понимается принципиальное отсутствие какой-либо зависимости между значениями импульса и энергии частицы *до* акта её рассеяния и *после* него. Предполагается, что после осуществления событий рассеяния вероятностное распределение значений энергии частиц, равно как и пространственной ориентации векторов их импульсов (волновых \mathbf{k} -векторов для квантовых частиц) — целиком определяются требованиями, необходимыми для осуществления именно *детального* равновесия системы при заданной термодинамической температуре.

Для частиц, имеющих ненулевую массу покоя, вышеуказанное утверждение подразумевает значение коэффициента аккомодации " α " газа на рассеивающей стенке, равное единице [17, стр. 27-29]. Это означает, что угловое распределение частиц, покидающих стенку после столкновения, обязано подчиняться закону Кнудсена, а энергия этих частиц — должна соответствовать вероятностному распределению Максвелла. В этом плане весьма характерной является следующая цитата [17, стр. 140]:

“Говорят, что [молекулярный] пучок рассеивается поверхностью диффузно, если свойства рассеянного пучка не отличаются от свойств потока частиц, пересекающих в равновесных условиях воображаемую плоскость, выделенную в газе. Мы будем использовать термин «косинусный закон рассеяния» (или иногда «кнудсеновский закон рассеяния») для обозначения углового распределения рассеянных частиц, пропорционального $\cos(\theta_f)$ [θ_f – угол отражения частицы от поверхности – В. С.]. Соответствующее распределение по скоростям в направлении (θ_f, φ_f) может быть связано с температурой поверхности, либо не связано с ней. Мы различаем диффузный и косинусный законы на основании недоказанного предположения о том, что рассеянный поток может достичь равновесного углового распределения без полной аккомодации энергии”.

¹ Только этот вариант, собственно, имеет практический интерес.

Ситуация, когда рассеяние частиц на отражающей поверхности осуществляется без полной аккомодации энергии, вообще-то не имеет отношения к случаю термодинамического равновесия. Однако здесь типичным является то, что цитируемым автором не обнаруживается качественной разницы между случаем упругого (изоэнергетического) рассеяния частиц, когда изменяется только угловое распределение скоростей, и ситуацией полной аккомодации, как энергии, так и импульсов частиц газа. Это видно из высказанного предположения (хотя и недоказанного) о том, что рассеянный поток может достичь равновесного углового распределения без полной аккомодации энергии.

Таким образом, предполагается, что при наличии термодинамического равновесия частица как бы *абсорбируется* рассеивающей поверхностью на период времени, достаточный для «забывания» ею своих прежних (до столкновения со стенкой) значений энергии и импульса. Потом данная частица вновь «испаряется» в пристеночное пространство с совершенно новыми параметрами, целиком определяемыми требованиями закона Кнудсена и максвелловского распределения.

Всё сказанное также в высшей степени характерно и для случая, когда тепловое электромагнитное излучение должно находиться в равновесии с некоторой стенкой, имеющей заданную термодинамическую температуру [36, стр. 675-676]:

“В проблемах теплового излучения особо важное значение имеет понятие так называемого *равновесного излучения*. Для установления этого понятия рассмотрим полость с неподвижными и непрозрачными стенками, температура которых поддерживается постоянной. Атомы и молекулы стенок переходят в возбуждённые состояния за счёт энергии теплового движения и при обратных переходах в невозбуждённые состояния дают излучение, заполняющее полость. Падая на стенки полости, лучистая энергия частично отражается, частично поглощается. Происходит изменение направления распространения, спектрального состава, поляризации, интенсивности излучения. В результате всех этих процессов, как это следует из общего начала термодинамики, в полости, в конце концов, устанавливается макроскопически вполне определённое состояние излучения, при котором за каждый промежуток времени количество излучённой лучистой энергии определённого цвета, направления распространения и поляризации в среднем равно количеству поглощённой энергии того же цвета, направления распространения и поляризации. Как и всякое равновесное состояние, оно характеризуется тем, что каждому микропроцессу, происходящему в системе, с той же вероятностью соответствует микропроцесс, идущий в обратном направлении (*принцип детального равновесия*). Благодаря этому состояние излучения в полости и остаётся *макроскопически неизменным* во времени. Переход в равновесное состояние, как и всякий статистический процесс, управляется *вероятностными законами*. В полости устанавливается хаотическое состояние излучения, которому соответствует *наибольшая вероятность*. Оно и называется равновесным излучением.

Свойства равновесного излучения: плотность лучистой энергии, её распределение по спектру частот и направлениям распространения, а также поляризация излучения *совершенно не зависят от формы и материала стенок полости*. Эти свойства, подобно со-

стоянию газа в сосуде, определяются *только температурой стенок полости*. Равновесное излучение *однородно*, т. е. его плотность одна и та же во всех точках внутри полости. Оно *изотропно и неполяризовано*: все возможные направления распространения излучения представлены с одинаковой вероятностью, а направления векторов \vec{E} и \vec{B} в каждой точке пространства хаотически меняются во времени. Поскольку излучение находится в тепловом равновесии со стенками, можно говорить о температуре не только стенок, но и о *температуре самого излучения*, считая по определению обе температуры равными. Надо, однако, подчеркнуть, что температура равновесного излучения есть *свойство самого излучения*, а не стенки, с которой оно находится в тепловом равновесии. О ней имеет смысл говорить и тогда, когда вообще нет никакой стенки. В частности, плотность энергии равновесного излучения однозначно определяет и его температуру.

Если стенки полости совершенно непоглощающие, например, идеально зеркальные, то в такой полости не будет поглощения и испускания света. В полость можно ввести излучение произвольного спектрального состава. Отражаясь от стенок, излучение меняет направление распространения, но его спектральный состав сохраняется неизменным. При надлежащей геометрической форме полости с зеркальными стенками возможны и такие случаи, когда сохраняются также направление распространения и поляризация излучения. Так будет, например, когда полость имеет форму прямого цилиндра с абсолютно зеркальными основаниями. Тогда луч света произвольной частоты и поляризации может распространяться туда и обратно параллельно оси цилиндра, последовательно отражаясь от зеркальных оснований. Но все подобные случаи являются *идеальными* и никогда точно не реализуются в действительности. Излучение в полости в этих случаях *неравновесно и неустойчиво*. Уже при сколь угодно малых отклонениях от идеальности, если только подождать достаточно долго, в полости обязательно установится равновесное излучение. Идеальные системы, однако, имеют большое значение в теоретических рассуждениях. Можно брать стенки абсолютно зеркальными и в то же время считать, что в полости всегда устанавливается равновесное излучение. Для этого достаточно, например, ввести в полость сколь угодно малое поглощающее и излучающее тельце — *пылинку*, по выражению Планка. Такая пылинка, практически не играя никакой роли в энергетическом балансе системы, переводит, однако, любое неравновесное состояние, возникшее в полости, в равновесное”.

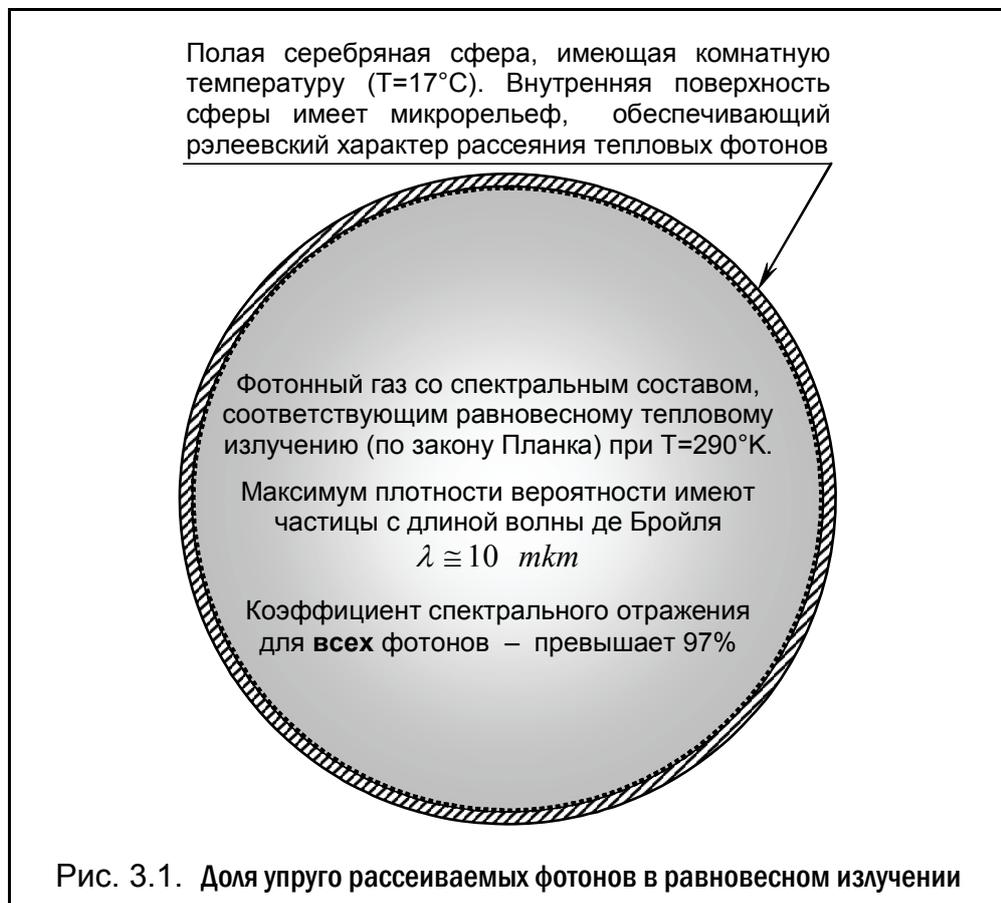
Хотя здесь и говорится о том, что "падая на стенки полости, лучистая энергия частично отражается, частично поглощается", из приведённого текста очевидно следующее: по мнению цитируемого автора, в ходе отражения равновесного излучения от стенок — не должны меняться вероятностные угловые характеристики этого излучения. Иначе говоря, при таком отражении предполагается обязательное выполнение закона Ламберта, что обеспечивает сохранение диффузного характера светового поля внутри полости. Таким образом, любые возможные изменения индикатрисы рассеяния

фотонов опять-таки целиком и полностью отдаются на откуп явлению поглощения и последующего переизлучения световых квантов, которое по определению обязано осуществляться в соответствии с надлежащими свойствами абсолютно чёрного тела [36, стр. 150, 681-683]. Имеется определённая аналогия между описанием случаев термодинамического равновесия в фотонном и молекулярном газе:

- фотоны электромагнитного излучения поглощаются стенками полости и «забывают» свои параметры (направленность вектора импульса, уровень энергии), которые они имели до столкновения со стенкой (аналог процесса абсорбирования молекул).
- Покидающие стенку фотоны излучаются в пристеночное пространство с угловым распределением, отвечающим закону Ламберта (аналог закона Кнудсена).
- Вероятностное распределение по энергиям излучаемых стенкой фотонов соответствует закону Планка (аналог распределения Максвелла).

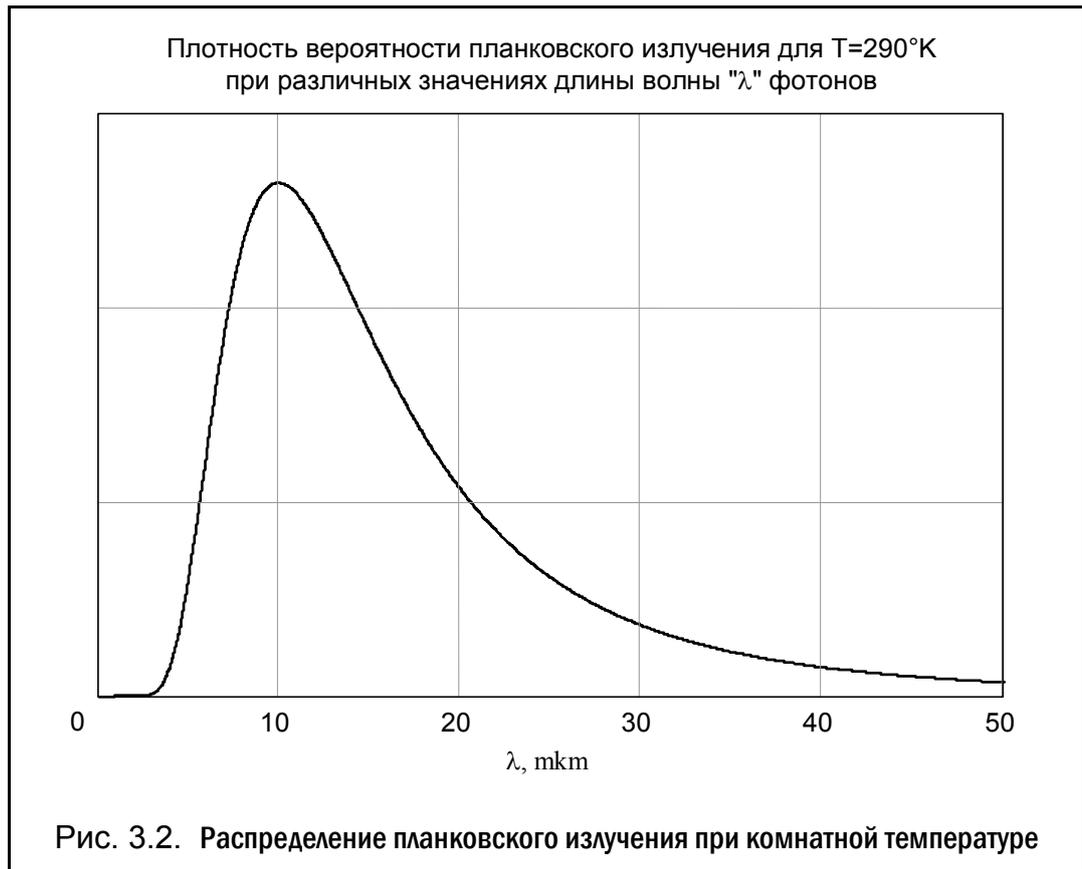
В настоящей работе уже обсуждались особые свойства упругого (изоэнергетического) отражения, например, электромагнитного излучения от какой-либо стенки, имеющего отличную от нуля дисперсию углового рассеяния фотонов. В частности отмечалось, что указанное дифракционное отражение — обязательно должно определённым образом изменять функцию распределения некоторого исходного («приготовленного») диффузного светового поля, если его привести в контакт с такой стенкой.

Попробуем на конкретном примере оценить то, как могут *количественно* соотноситься между собой вероятности упругого отражения и неупругого рассеяния частиц квантового газа на стенках объёма, содержащего этот газ. Для этого рассмотрим реальную физическую систему, изображённую на рис. 3.1:



Данная физическая система представляет собой полую сферу, изготовленную из серебра. Температура этой сферы равна $T = 290^\circ K \cong 17^\circ C$. Внутренняя полость сферы первоначально заполняется специально «приготовленным» термодинамически равновесным излучением, т. е. диффузным излучением со спектральным составом, соответствующим закону Планка для вышеуказанной температуры.

Качественный характер зависимости плотности вероятности того, что фотоны электромагнитного излучения с температурой $T = 290^\circ K$ имеют ту или иную длину волны, представлен на рис. 3.2:



Как видно из этого графика, абсолютное большинство фотонов имеет длину волны де Бройля, существенно превышающую, например, $\lambda = 1 \text{ мкм}$. Максимум плотности вероятности приходится на излучение с $\lambda \cong 10 \text{ мкм}$. Относительная доля числа фотонов, имеющих длину волны $\lambda < 1 \text{ мкм}$, составляет около $\approx 5.6788 \cdot 10^{-18}$. Таким образом, есть основания считать, что практически все фотоны рассматриваемого излучения обладают длиной волны $\lambda > 1 \text{ мкм}$.

О спектральном коэффициенте отражения серебра известно то, что он монотонно возрастает для фотонов с $\lambda > 0.316 \text{ мкм}$. При $\lambda \geq 1 \text{ мкм}$ этот коэффициент гарантировано превышает величину $\rho_\lambda \approx 0.970$ и по некоторым данным может достигать значения $\rho_\lambda \approx 0.995$ [18, стр. 47-49], [42, стр. 640], [45, стр. 783].

Из вышесказанного следует сделать вывод, что никак не менее 97% (а, скорее всего, более 99%) всех случаев взаимодействия фотонов со стенками полости имеют характер именно *отражения*. Для оставшейся малой доли случаев неупругого рассеяния

частиц можно без лишних споров принять на веру «активно продвигаемое» предположение о том, что свойства этого вида рассеяния — типичны для абсолютно чёрного тела (ламбертовская индикатриса рассеяния, планковский спектр излучения). Таким образом, итоговое глобальное статистическое равновесие в физической системе будет определяться результатом «противоборства» двух различных факторов рассеяния:

- Группа факторов, стремящихся превратить тепловое электромагнитное излучение внутри полости серебряной сферы в абсолютно изотропное (диффузное) излучение. В состав этой группы входят акты поглощения и последующего переизлучения фотонов, смещающие параметры этого излучения в направлении, характерном для излучения абсолютно чёрных тел. К числу таких процессов следует отнести все случаи неупругого рассеяния фотонов как на стенках, так и, возможно, во внутриобъёмном пространстве, — на так называемых «пылинках Планка» (если они есть в системе), упомянутых в ранее цитированном первоисточнике [36, стр. 675-676].
- Фактор упругого (изоэнергетического) рассеяния частиц квантового газа на поверхности, ограничивающей объём этого газа. Указанное рассеяние должно иметь отличную от нуля угловую дисперсию, т. е. необходимо наличие дифракционных явлений. Рассеяние этого рода будет стремиться перевести ламбертовское угловое распределение в пристеночном пространстве полости в распределение Эйлера.

Для обеспечения существования факторов второй группы необходимо наличие на внутренней поверхности серебряной сферы микрорельефа такого масштаба, который бы обеспечил *рэлеевский* [22, стр. 247] характер дифракционного рассеяния квантовых частиц¹. При несоблюдении данного требования любое упругое отражение фотонов от поверхности сферы будет иметь зеркальный характер, никак не способный изменить функцию распределения частиц:

- Если масштаб неровностей будет слишком мал по сравнению с длинами волн фотонов, то частицы станут отражаться от этой поверхности, как от *ровного* зеркала с макроскопической формой, определяемой геометрической формой самой сферы.
- Если же масштаб неровностей будет слишком велик по сравнению с длинами волн, то фотоны станут зеркально отражаться от отдельных граней таких неровностей, как от «*мятого*» зеркала со сложным макроскопическим рельефом поверхности.

С принципиальной точки зрения, разумеется, не имеет значения конкретная количественная пропорция между средним по времени числом актов дифракционного и неупругого рассеяния: важно, что оба вида рассеяния в системе присутствуют. Значит, наиболее вероятное макросостояние такой системы будет формироваться как итог одновременного проявления этих факторов (см., например, на рис. 3.1 предполагаемое анизотропное распределение фотонов). Однако с практической стороны весьма важен сам факт наличия организованных должным образом систем, в которых доля актов именно *дифракционного* рассеяния частиц — имеет очень большой удельный вес.

Разумеется, всё здесь сказанное в той или иной мере относится к общему случаю газа квантовых частиц, имеющему произвольную природу (фотонное излучение, плазма электронов проводимости в твёрдом теле или молекулярный газ).

¹ Желательно, чтобы значение критерия Рэлея [22, стр. 216] отвечало требованию: $R_z \approx \lambda / (8 \cdot \cos \theta)$, где R_z - разброс высоты неровностей поверхности, λ - типичная длина волны частиц, θ - характерный угол падения частиц на поверхность.

Теплоэнергетические устройства с дискретным циклом

С точки зрения статистической физики и термодинамики преобразование тепловой энергии в другие её виды (механическую, электрическую и т. д.) основано на том, что некое «рабочее тело»¹, применяемое в соответствующем теплоэнергетическом устройстве (физической системе), может пребывать в различных состояниях. При смене одного состояния другим часть внутренней тепловой энергии рабочего тела используется, например, для совершения механической работы.

Различные состояния, в которых пребывает рабочее тело, «сепарируются» (т. е. разделяются между собой) либо во времени (тепловые двигатели с дискретным циклом), либо в пространстве (двигатели с непрерывным циклом).

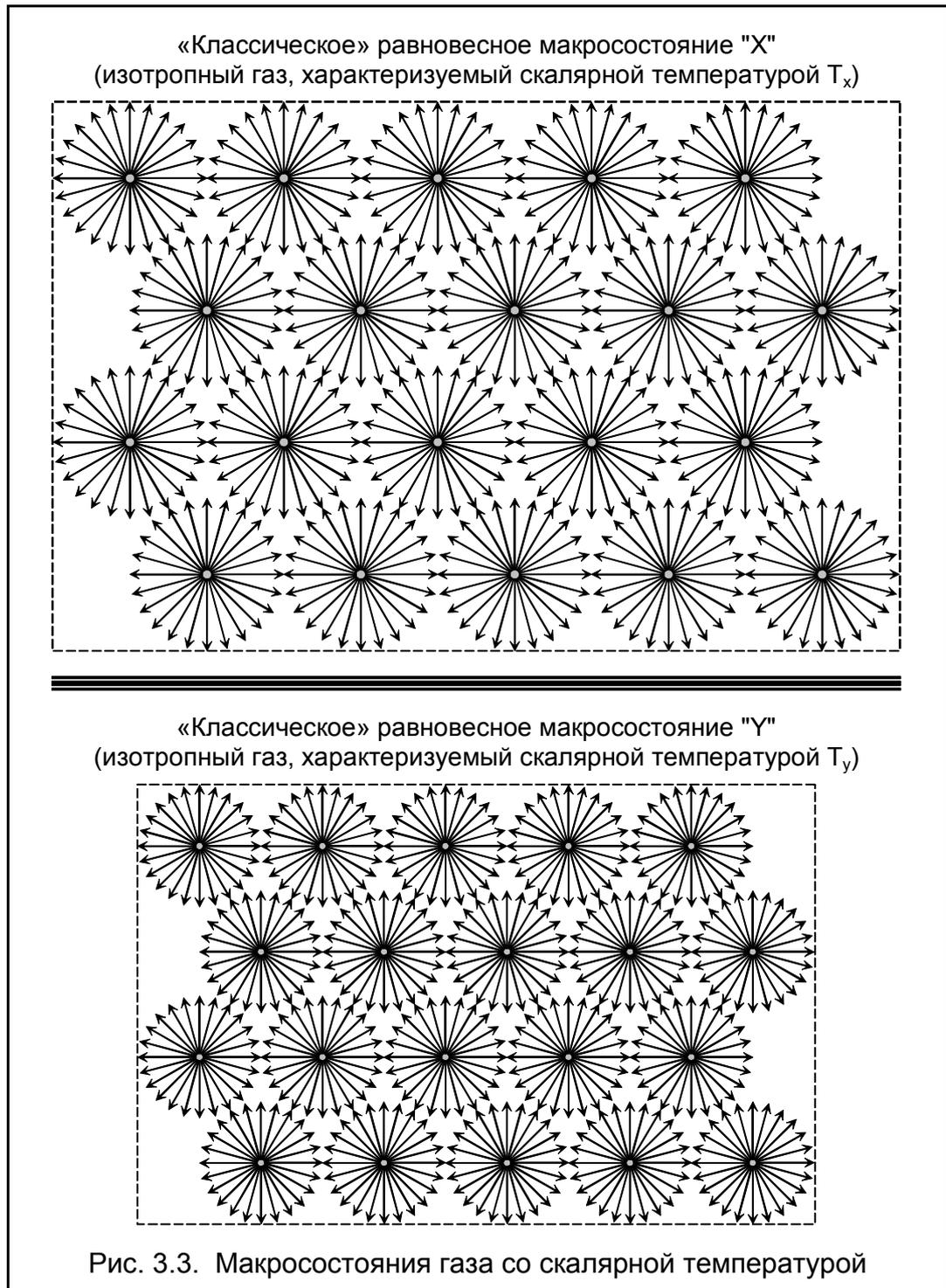
Реализацию дискретного цикла можно описать на примере поршневого двигателя внутреннего сгорания. Здесь рабочее тело в *одном и том же месте* геометрического пространства (цилиндры двигателя), но в *различные моменты времени* (элементы цикла), последовательно испытывает сжатие, нагрев за счёт сгорания топлива, и расширение с одновременным совершением механической работы. Цикл замыкается при охлаждении рабочего тела в атмосфере, куда осуществляется выхлоп продуктов сгорания.

Образцом непрерывного термодинамического цикла могут служить процессы в турбореактивном авиационном двигателе. В этом случае рабочее тело *одновременно* сжимается в компрессоре, нагревается в камере сгорания и расширяется в сопловом аппарате турбины и выхлопной системы. Однако данные процессы «разнесены» в геометрическом пространстве, поскольку компрессор, камера сгорания и сопловой аппарат представляют собой отдельные технические узлы, одновременно функционирующие в различных частях двигателя.

В приведённых примерах в качестве рабочего тела использовался молекулярный газ, что, однако, не нарушает общность получаемых выводов. Заметим, что изменение состояния рабочего тела здесь всегда однозначно связывается с изменением его энтальпии (теплосодержания). Это естественно, поскольку энтальпия — по определению является функцией состояния термодинамической системы [53, стр. 155].

Так как, согласно аксиоматической гипотезе статистической физики, у замкнутой системы, обладающей определённым уровнем энергии, имеется всегда *единственное* наиболее вероятное (равновесное) макроскопическое состояние, то перейти в другое состояние возможно лишь путём изменения энергии (например, теплосодержания) этой системы. Иными словами, изменение состояния осуществляется экстенсивным способом, т. е. когда меняются количественные параметры функции распределения импульсов частиц рабочего тела в пространстве (при этом варьируется лишь скалярная величина импульсов, — в соответствии с максвелловским вероятностным распределением для текущей температуры). Угловое же распределение импульсов частиц остаётся одинаковым (сферически симметричным) в каждом состоянии, т. е. равновероятным для любого направления. На рис. 3.3 дана иллюстрация того, как с точки зрения статистической физики обязательно должны выглядеть индикатрисы углового распределения импульсов частиц, соответствующие различным равновесным состояниям газа (состояние вида "X" характеризуется более высокой температурой, чем состояние "Y").

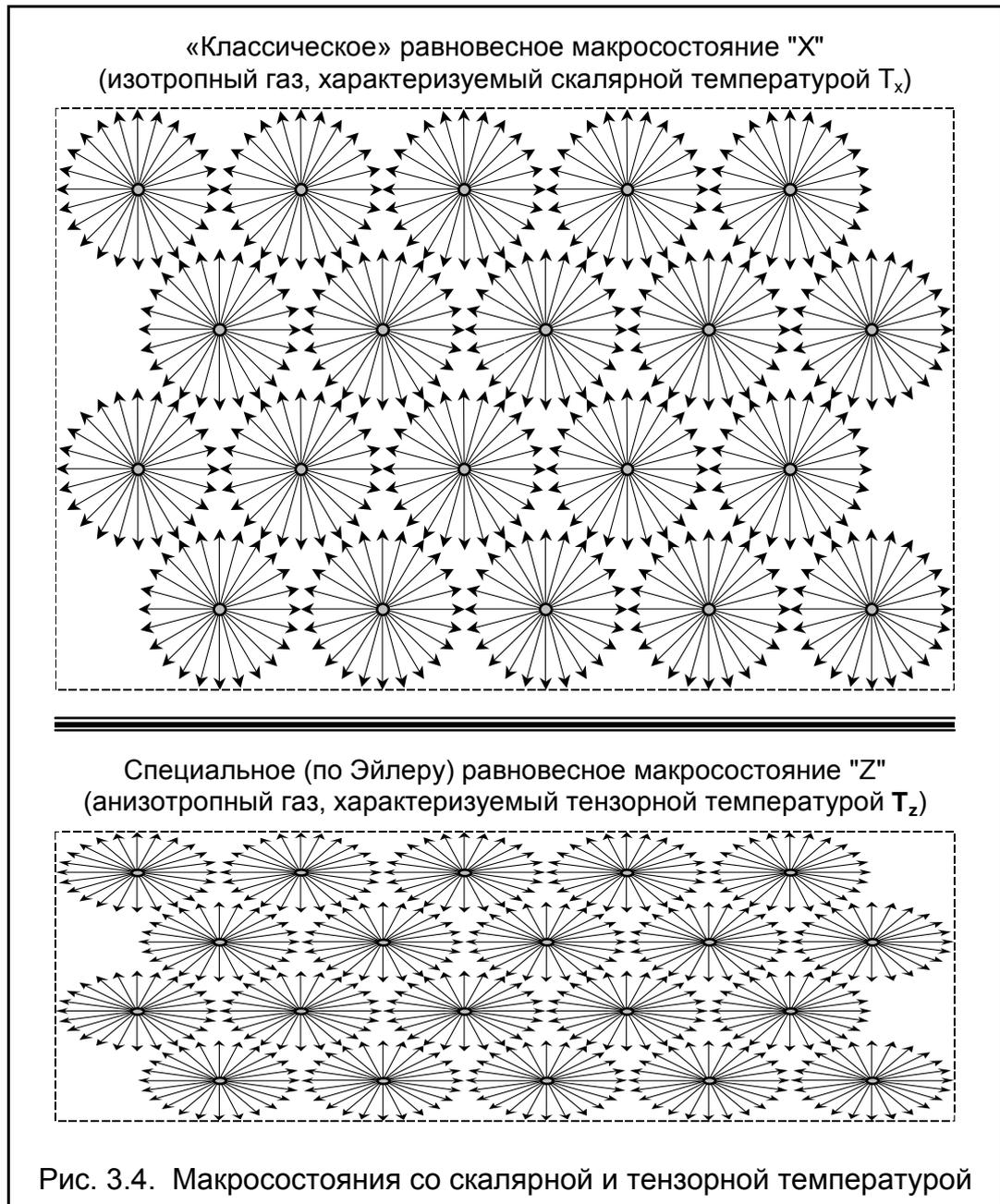
¹ Это может быть как обычный газ классических частиц, так и некий специальный объект, например, плазма электронов проводимости и «дырок» в полупроводниковом термоэлектрогенераторе.



Описанная методология изменения состояния рабочего тела, однозначно требующая изменения и его энтальпии, приводит к принципиальному ограничению той доли тепловой энергии, которая может быть преобразована в другие её виды. Относительный размер этой доли, как известно, зависит от соотношения термодинамических температур, характеризующих различные состояния. В любом случае коэффициент полезного действия " η " теплоэнергетического устройства, работа которого основана на вышеизложенных принципах, не может превышать предельной величины, обусловленной циклом Карно: $\eta \leq 1 - T_y/T_x$, где T_y – температура холодильника, а T_x – нагревателя.

В настоящей работе предполагается, что параметры наиболее вероятного (равновесного) состояния замкнутой физической системы могут зависеть не только от уровня её энергии, но и от воздействия на данную систему неких специальных («управляющих») факторов. Привнесение воздействия таких факторов в систему, равно как и исключение указанного воздействия, — не связано с какими-либо затратами энергии.

В качестве иллюстрации сказанного на рис. 3.4 приведены изображения индикаторис угловых распределений импульсов частиц газа, которые могут иметь место для двух различных равновесных (т. е. наиболее вероятных) макросостояний "X" и "Z".



Не смотря на то, что состояния "X" и "Z" имеют одинаковую энергию (располагаются на одной и той же изоэнергетической поверхности в фазовом пространстве), их параметры отличаются друг от друга. Эти различия обусловлены угловой анизотропией

индикатрис, описывающих плотность вероятности движения частиц в тех или иных пространственных направлениях. Ранее уже приводились примеры условий, при которых возможно возникновение различий такого рода: на рис. 2.12 (стр. 37) и на рис. 2.17 (стр. 47) рассматривались конкретные ситуации, соответствующие изображённым на рис. 3.4 макроскопическим состояниям "X" и "Z".

На рис. 3.5 приведена схема особого теплового двигателя с дискретным циклом, на практике использующего возможность варьирования состояний замкнутой системы.

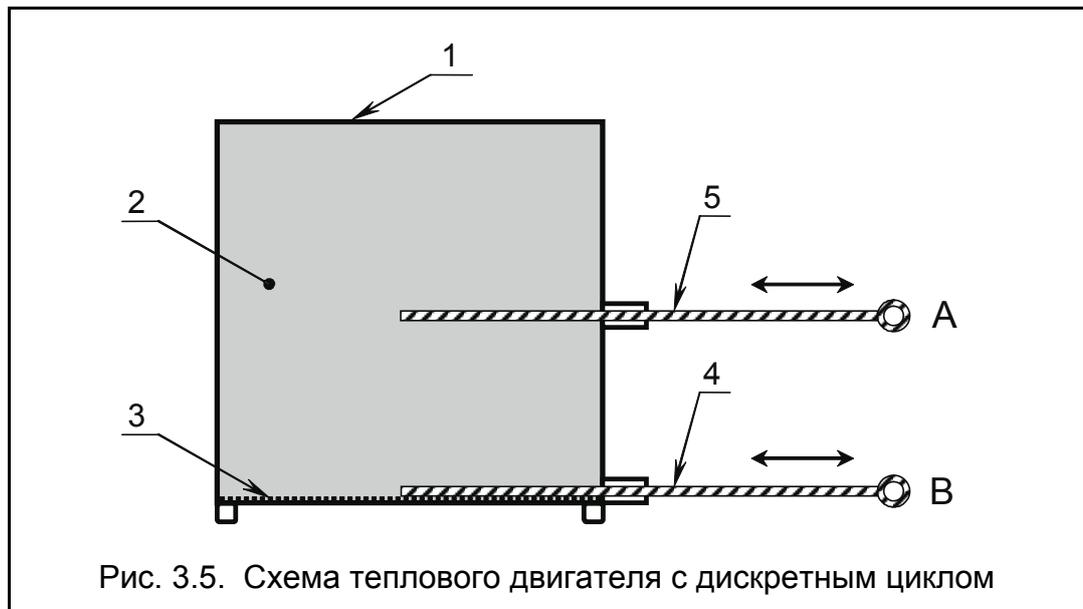


Рис. 3.5. Схема теплового двигателя с дискретным циклом

Изображённое устройство состоит из следующих частей:

1. Корпус герметичного сосуда постоянного объёма.
2. Газ квантовых (см. пункт 3) частиц, заполняющий весь объём сосуда 1. Длина свободного пробега частиц сопоставима с линейными размерами сосуда, т. е. весь газ постоянно находится в кнудсеновской области (для молекул идеального газа или газа фотонов это требование всегда выполняется автоматически). Длины волн де Бройля частиц — существенно меньше линейных размеров сосуда 1. На внутренней поверхности сосуда частицы испытывают зеркальное отражение или диффузное рассеяние (исключение составляет поверхность 3, о которой сказано ниже).
3. Часть внутренней поверхности сосуда 1, при взаимодействии с которой квантовые частицы газа 2 испытывают упругое волновое рассеяние (дифракцию). Соотношение геометрических параметров микрорельефа данной поверхности и типичных для частиц 2 длин волн де Бройля должно быть таково, чтобы обеспечивать так называемый *рэлеевский* характер волнового рассеяния при дифракции [22, стр. 216].
4. Задвижка «В», способная экранировать внутреннюю поверхность 3 от контакта с основным объёмом газа, находящегося в сосуда 1. Задвижка имеет очень малую толщину, вследствие чего при её вставлении в сосуд 1 или её выдвигении из этого сосуда — практически никак не изменяется объём, занимаемый газом 2. Для определённости примем, что все поверхности задвижки являются зеркально гладкими.
5. Задвижка «А», способная делить внутреннее пространство сосуда 1 на две изолированные друг от друга части. Будем считать, что эта задвижка «А» — такая же тонкая и гладкая, как и задвижка «В» (см. пункт 4).

Опишем первоначальное состояние системы, изображённое на рис. 3.6. В таком состоянии задвижка "А" выведена из сосуда, т. е. его внутренний объём не разделён на части. Задвижка "В" — полностью вставлена в сосуд, что исключает возможность дифракции частиц газа на неровной нижней поверхности. Сосуд заполнен диффузным газом, параметры которого соответствуют изотропному равновесному состоянию¹.

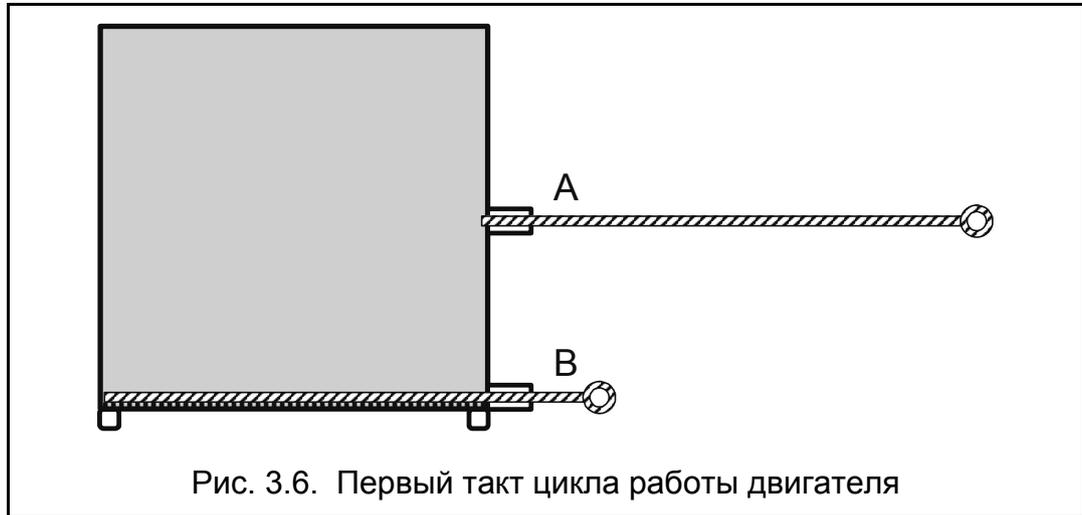


Рис. 3.6. Первый такт цикла работы двигателя

Если теперь изменить конфигурацию системы, удалив из её объёма задвижку "В" (см. рис. 3.7), то квантовые частицы газа получают возможность дифракционного рассеяния на нижней поверхности сосуда, которая имеет соответствующий микрорельеф.

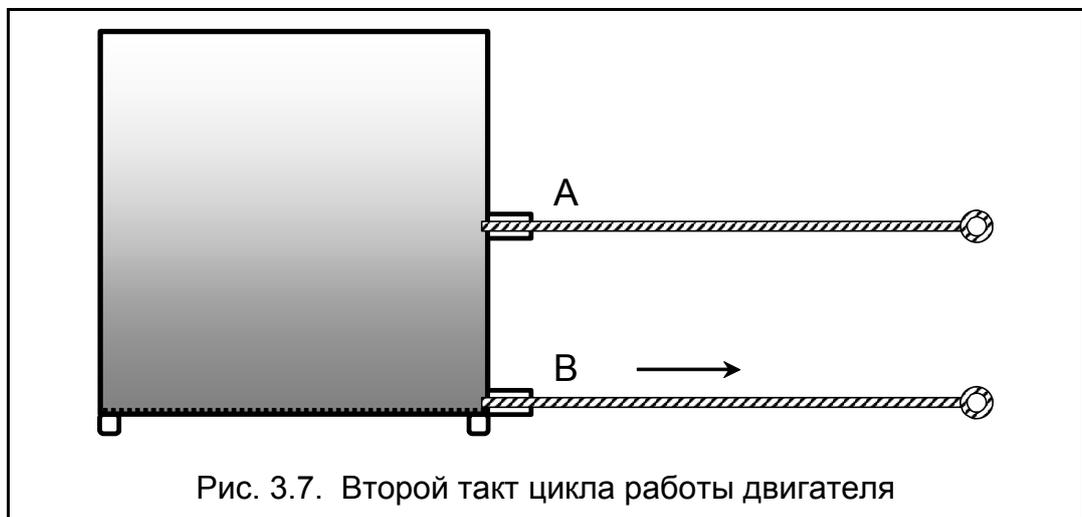


Рис. 3.7. Второй такт цикла работы двигателя

Дифракционный характер рассеяния квантовых частиц на какой-либо поверхности стремится изменить изначально приготовленное изотропное состояние диффузного газа (см. состояние "X" на рис. 3.4, стр. 72) — на анизотропное (состояние "Z" на рис. 3.4). При этом кнудсеновское угловое распределение покидающих поверхность частиц «смещается» (в той или иной степени) в сторону эйлеровского распределения.

¹ Если изначально приготовленное состояние газа не является диффузным, то оно перейдёт в таковое с течением времени, если хотя бы одна поверхность, с которой контактирует газ, рассеивает частицы в соответствии с законом Кнудсена (Ламберта).

В результате данного процесса внутриобъёмная концентрация частиц в системе также становится анизотропной: частицы газа «более охотно» пребывают в той части геометрического пространства, которая непосредственно примыкает к дифракционно рассеивающей поверхности (см. об этом подглаву "Выполнимость законов Кнудсена и Ламберта в квантовых системах" на стр. 41; обратите внимание на рис. 2.21, стр. 55).

Следует особо отметить то обстоятельство, что работа по перемещению задвижек "А" и "В" — может быть сколь угодно малой по следующим причинам:

- Поскольку задвижки "А" и "В" являются очень тонкими, то их перемещение практически никак не меняет объёма, занимаемого газом внутри корпуса 1 (см. рис. 3.5). Следовательно, работа, связанная с соответствующим расширением или сжатием газа, может быть сколь угодно малой.
- Принято, что линейные размеры заполняемого газом объёма значительно больше типичных длин волн де Бройля квантовых частиц. Поэтому возможное изменение указанных длин волн, обуславливаемое наличием или отсутствием внутри данного объёма задвижек "А" и "В", можно сделать сколь угодно малым по величине¹. Так как импульс квантовой частицы обратно пропорционален длине её волны де Бройля, то описанная неизменность длин волн означает, что перемещение задвижек практически не будет влиять на кинетическую составляющую энергии частиц.
- Так как поверхности задвижек "А" и "В" являются зеркальными, то их перемещение не требует затраты работы, связанной с трением о газ. В прочем, требование зеркальности не является совершенно обязательным. Даже если бы, например, поверхности задвижек рассеивали частицы газа диффузно, то величину указанной работы можно всё равно сделать сколь угодно малой: эта работа пропорциональна произведению силы трения на путь. Величина пути, проходимая задвижками при их перемещении, в любом случае остаётся неизменной. Сила же трения зависит (возможно, нелинейно) от относительной скорости движения газа и поверхности: чем меньше эта скорость, тем меньше и сила трения. Таким образом, даже если задвижки имеют шероховатую поверхность, можно сделать работу, затрачиваемую на их трение о газ, сколь угодно малой, обеспечив достаточно малую (но, разумеется, не нулевую) скорость перемещения этих задвижек.

Из всего вышесказанного следует, что переход рассматриваемой физической системы от макросостояния, изображённого на рис. 3.6, к макросостоянию, представленному на рис. 3.7, никак не связан с изменением объёма или энергии этой системы (она остаётся замкнутой). Иначе говоря, такое изменение состояния, обусловленное определённой внутренней реконfigurацией системы, не требует (по крайней мере, в принципе) вообще никаких внешних энергозатрат.

Теперь зафиксируем пространственно неоднородное распределение частиц газа, которое было получено в изображённом на рис. 3.7 макроскопическом состоянии. Для этого введём задвижку "А" внутрь занимаемого газом объёма, т. е. в сосуд 1 системы.

¹ Если, например, длина волны де Бройля частицы равна коллинеарной её импульсу линейной протяжённости объёма системы, то введение внутрь этого объёма задвижки "А" как бы «располовинивает» такую волну. Так как, в отличие от дождевого червяка, частица не может быть разрезана на две, то ей необходимо будет «выбрать», в какой половине поделённого объёма она останется. В результате такого «неявного сжатия» содержащего частицу объёма, длина волны этой частицы должна стать вдвое меньше.

На рис. 3.8 можно видеть результат такого действия. Очевидно, что средняя объёмная концентрация частиц газа в нижней части сосуда — значительно выше, чем в верхней его части. Теперь же обе эти части герметично отделены друг от друга задвижкой "А". Как уже разъяснялось ранее, работа, затрачиваемая на перемещение задвижки, может быть сколь угодно малой, т. е. не является существенной для рассмотрения.

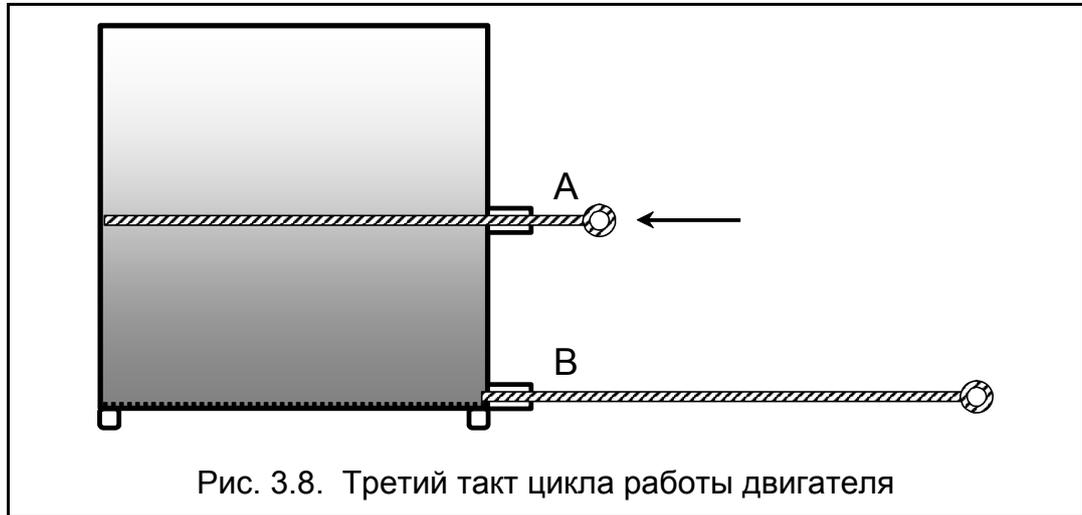


Рис. 3.8. Третий такт цикла работы двигателя

Если же теперь опять ввести в занимаемый газом объём задвижку "В", то процесс дифракционного рассеяния частиц на нижней поверхности сосуда — прекратится. Новое состояние системы, изображённое на рис. 3.9, будет характеризоваться тем, что в обеих частях объёма системы, разделённых задвижкой "А", газ будет находиться в классически равновесных (изотропных) состояниях¹, но при различной концентрации.

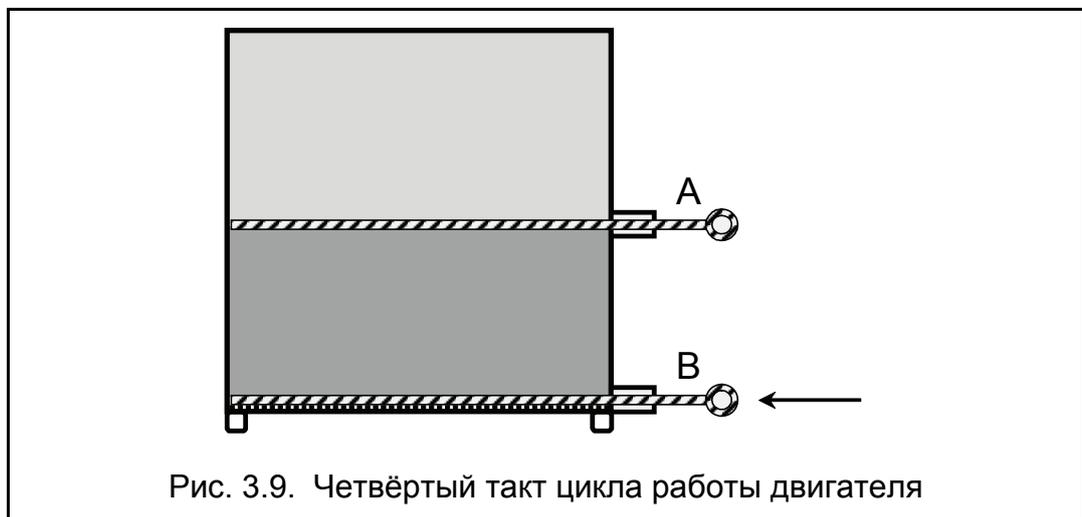


Рис. 3.9. Четвёртый такт цикла работы двигателя

В этом новом состоянии системы (рис. 3.9) такие параметры, как температура и давление газа, опять представляют собой классические скалярные (не тензорные) вели-

¹ В указанные состояния газ с течением времени перейдёт только при наличии факторов, стохастизирующих динамику движения частиц. Это может быть диффузное рассеяние на поверхностях, с которыми контактирует газ, или какие-либо внутриобъёмные центры рассеяния (например, «пылинки Планка» — для случая фотонного газа).

чины. Будем считать, что итоговое отличие в параметрах сепарированных объёмов газа здесь сводится лишь к разнице в концентрациях его частиц¹, т. е. к перепаду давлений.

Теперь можно замкнуть цикл путём выравнивания давления в нижней и верхней части сосуда, т. е. выполнить переход от состояния, изображённого на рис. 3.9, к исходному состоянию, которое можно было увидеть на рис. 3.6 (стр. 74). Разумеется, этот перепад давления логично использовать для выполнения некоторой полезной работы. Газ, перетекающий из одной части сосуда в другую, мог бы, например, двигать поршень или вращать колесо турбины. В таком случае итоговое состояние системы после выравнивания давления не будет совпадать с исходным, так как часть внутренней энергии газа² будет преобразована в работу, а значит, термодинамическая температура этого газа станет меньше первоначальной (см. рис. 3.6) величины.

Однако указанная разница температур рабочего тела представляет собой единственное различие между начальным и конечным состоянием системы. В частности, в системе полностью отсутствуют какие-либо компенсационные изменения, обязательное наличие которых предполагается вторым законом термодинамики. Иначе говоря, в описанной ситуации возможна реализация циклического процесса, единственным результатом которого будет являться *полное* преобразование тепловой энергии в работу.

Разумеется, с эмоциональной точки зрения всё вышесказанное выглядит совершенно ужасно, поскольку результат работы описанного устройства целиком соответствует определению «вечного двигателя второго рода», которое Клаузиус и Кельвин³ дали ещё в девятнадцатом веке. Тем не менее, предлагаемый в настоящей работе апостериорный подход к анализу изучаемых явлений — методологически вполне корректен и, строго говоря, принципиально не противоречит модельным представлениям статистической физики и термодинамики, о чём здесь уже много говорилось.

Ранее отмечалось, что такие понятия, как термодинамическая температура, давление газа и т. д., не могут быть использованы в общепринятой на текущий момент скалярной⁴ форме для описания состояний исследуемых систем. Например, в двух равно-

¹ Для простоты здесь не рассматриваются особые «тонкие» моменты, связанные с тем, что в изображённом на рис. 3.8 состоянии не исключено наличие пространственной сепарации частиц газа по их кинетическим энергиям. В этом случае средняя кинетическая энергия частиц, находящихся в различных частях объёма системы, может быть не одинакова. Тогда в итоге не будет совпадать и скалярная термодинамическая температура в разных частях газового объёма в приведённом на рис. 3.9 макросостоянии.

² Здесь под внутренней энергией понимается та часть теплосодержания (энтальпии) газа, которая определяется кинетической энергией теплового движения его частиц.

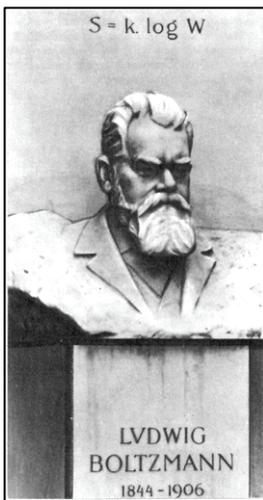
³ Справедливости ради необходимо заметить, что все известные учёные, оставившие реальный след в истории, никогда не были категоричны в своих оценках тех или иных положений научных дисциплин (отсутствие «комплекса оракула» следует, видимо, считать обязательным признаком высокого профессионализма). В частности, лорд Кельвин (Уильям Томсон), *постулируя* невозможность осуществления «вечного двигателя второго рода», осторожно добавлял: "... если только в великой кладовой мироздания не окажутся наготове неизвестные нам источники".

⁴ Скалярная функция, определённая как скалярное поле геометрического пространства, может зависеть от координат в этом пространстве, но не от углового направления.

весных (наиболее вероятных в заданных условиях) макросостояниях "X" и "Z", изображённых на рис. 3.4 (стр. 72), средняя кинетическая энергия частиц газа предполагается одинаковой. Однако вследствие анизотропного распределения энергии между степенями свободы в состоянии "Z" такая характеристика, как, например, давление, будет зависеть не только от координат, но и от углового направления в геометрическом пространстве, т. е. будет являться тензорной¹ величиной.

В этом свете понятие *энтропии* также надлежит применять корректным образом, чему посвящена нижеследующая подглава.

Энтропия реальных физических систем



На центральном кладбище Вены находится могила Людвигу Больцмана. Надгробие этой могилы содержит гравировку: $S = k \cdot \log W$. Это известная формула статистической физики, описывающая энтропию "S" текущего макроскопического состояния системы. Энтропия выражена через число микросостояний "W", которые образуют данное макросостояние. Специальный коэффициент пропорциональности "k", всегда имеющий одно и то же неизменное значение, называется «постоянной Больцмана».

Согласно Больцману, энтропия есть попросту мера вероятности состояния физической системы ([01, стр. 40-41], [02, стр. 12, 354-355, 367-370, 389-391], [06, стр. 696-697], [23, стр. 47, 108-109, 318], [27, стр. 33, 46], [29, стр. 81], [30, стр. 131-132, 147-150], [37], [38, стр. 102-107] и т. д.). Типичная конкретная формулировка этого определения, приведённая в книге Ч. Киттеля "Статистическая термодинамика" [23, стр. 47], выглядит, например, так:

“По Больцману самопроизвольные необратимые процессы являются проявлением того, что система стремится к переходу от менее вероятного неравновесного состояния к наиболее вероятному равновесному состоянию. Связывая такую трактовку вопроса с понятием энтропии, Больцман получил следующую формулу: $S = k \cdot \ln(P)$, где P – термодинамическая вероятность состояния системы, а k – постоянная Больцмана ...”².

Таким образом, по Больцману термодинамическая вероятность состояния "P" системы — должна быть детерминированной функцией того числа микросостояний, которые образуют данное макросостояние. Если обозначить общее число указанных

¹ Скалярные функции представляют собой частный случай тензорных объектов, определяемых как тензор нулевого ранга («абсолютный скаляр») [25, стр. 496].

² Данная формулировка «закона увеличения энтропии», связанная с понятием термодинамической вероятности "P", является простой тавтологией (логическим тождеством), поскольку именно то состояние, к которому стремится система в процессе её релаксации к равновесию, и называется *наиболее вероятным* по определению. Если же вводимое понятие энтропии "S" связывается с вероятностью состояния системы "P" однозначной и обратимой функциональной зависимостью [25, стр. 99], то такая энтропия является лишь неким «нелинейным вариантом» этой самой вероятности – В. С.

микросостояний, как " N " (это несколько более привычно, чем " W "), то в статистической физике энтропия с точностью до постоянного коэффициента равна: $S \cong \ln(N)$. В то же время полная математическая дефиниция энтропии, как меры неопределённости дискретного¹ распределения с вероятностью реализации отдельных его элементов p_n , имеет следующий вид [09, стр. 294], [25, стр. 558], [31, стр. 115]:

$$H \equiv S = - \sum_{n=1}^N p_n \cdot \log(p_n) \quad (3.1)$$

В формуле (3.1) основание логарифма может быть выбрано произвольно. Что же касается значений вероятностей p_n , характеризующих конкретные реализации² описываемого дискретного распределения, то в общем случае данные значения отнюдь не обязаны быть одинаковыми. Единственное, что требуется от p_n , это выполнение условий нормировки и принадлежности к соответствующей допустимой области:

$$\sum_{n=1}^N p_n = 1 \text{ при } p_n \in [0, 1] \text{ для } \forall n \in [1, N]. \quad (3.2)$$

Существующему аппарату статистической физики нет никакой пользы от определения энтропии, данного в форме (3.1), если ничего не известно о том, какие величины имеют элементарные вероятности p_n при частных значениях " n ". Если же принять во внимание гипотезу о равновероятности всех доступных системе микросостояний, то можно дополнительно получить следующее равенство:

$$p_n = \frac{1}{N} = Const \text{ для } \forall n \in [1, N]. \quad (3.3)$$

С учётом дополнительного свойства (3.3) общее выражение для энтропии (3.1) преобразуется в свою частную форму (с точностью до постоянной " k "), справедливую лишь в случае соблюдения аксиоматических принципов статистической физики:

$$S = - \sum_{n=1}^N p_n \cdot \ln(p_n) = - \sum_{n=1}^N \frac{1}{N} \cdot \ln\left(\frac{1}{N}\right) = - \ln\left(\frac{1}{N}\right) = - [\ln(1) - \ln(N)] = \ln(N) \text{ при } p_n \equiv \frac{1}{N} \quad (3.4)$$

Параметры состояния тех квантовых систем специального вида, которые исследуются в настоящей работе, могут быть корректно проанализированы с привлечением понятия энтропии в его полной математической форме (3.1). Что же касается «локализованной версии» определения энтропии (3.4), использованной Л. Больцманом для нужд статистической физики девятнадцатого века, то она принципиально не имеет никакого отношения к модельному описанию изучаемых систем.

В функционировании ранее рассмотренного теплового двигателя с дискретным циклом (см. рис. 3.5 на стр. 73) ключевым моментом с «энтропийной точки зрения» является то, что модификация вектора дискретных вероятностей p_n , имеющая место

¹ Мы здесь рассматриваем именно *дискретную* форму (3.1) определения энтропии через формулу Шеннона (Shannon C.), так как это диктуется практическими интересами: как уже говорилось ранее, для замкнутой квантовой системы число доступных ей микросостояний всегда счётно (ограничено в своём количестве). Следовательно, вероятностная функция реализации этих микросостояний должна быть дискретной.

² В физике p_n – это вероятности осуществления отдельных микросостояний системы.

при перемещении задвижки "B", носит изоэнергетический характер, т. е. не связана с изменением энергии замкнутой системы. Макроскопическое состояние системы в момент времени сразу после изменения положения задвижки "B", является менее вероятным, чем то же самое макросостояние, но до начала перемещения этой задвижки.

На первый взгляд описанная замена статуса одного и того же макросостояния с более вероятного на менее вероятный кажется принципиально неосуществимой вследствие самого определения понятия вероятности. В статистической физике вероятность пребывания замкнутой системы в некотором макросостоянии однозначно связывается с величиной объёма той области фазового пространства, нахождение в которой соответствует рассматриваемому макросостоянию. Всякая же коррекция размеров указанного объёма неизбежно вызывает изменение параметров самого этого макросостояния. Но в данном случае смена вероятностей происходит иным образом, требующем разъяснения.

Предположим, что мы общаемся с человеком, имеющим крайне примитивные познания в области небесной механики. Для этого человека являются вполне осмысленными (и имеющими определённый ответ) такие вопросы, как:

- Где у Земли находится край?
- Где у Земли находится «верх», а где – «низ»?
- На чём Земля держится? И так далее...

Человеку, обладающему столь «бытовыми» представлениями об астрономии, чрезвычайно трудно будет объяснить, например, движение Луны вокруг Земли, как *непрерывный процесс падения* этого небесного тела на Землю (хотя так оно и есть). Процесс падения непременно понимается как некое перемещение в направлении «сверху вниз». Поэтому любое падение, по мнению данного человека, обязательно должно закончиться по достижении падающим телом некоей «нижней точки». В противном случае этапы падения обязаны перемежаться во времени с этапами, в ходе которых ранее падавшее тело должно подниматься обратно «наверх», дабы компенсировать возникшую в результате падения потерю высоты. Ну и, разумеется, всякий процесс падения обязательно связывается в сознании этого человека с изменением *скалярной величины* скорости (а значит и кинетической энергии) падающего тела. При этом кажется совершенно непостижимым то обстоятельство, что состояние падения какого-либо тела может проявляться лишь в постоянном изменении *направления* его движения.

Аналогичную ситуацию можно обнаружить в вопросах, связанных с анализом энтропии физических систем. Традиционные представления на этот счёт заключаются в том, что возрастание энтропии в замкнутой системе, которое по определению обязано иметь место в процессе любого перехода от менее вероятного состояния к более вероятному, воспринимается примерно как описанное падение «сверху вниз». Иначе говоря, предполагается, что любые релаксационные процессы в этой системе должны обязательно прекратиться по достижении некоторого наиболее вероятного (равновесного) состояния, характеризуемого максимальным значением энтропии. Если рассматривать непрерывную работу какого-либо теплового двигателя (такой двигатель уже нельзя считать замкнутой системой), то его полный цикл должен содержать элементы, в ходе которых энтропия рабочего тела не только увеличивается, но также и уменьшается на соответствующую величину, на что затрачивается определённая энергия.

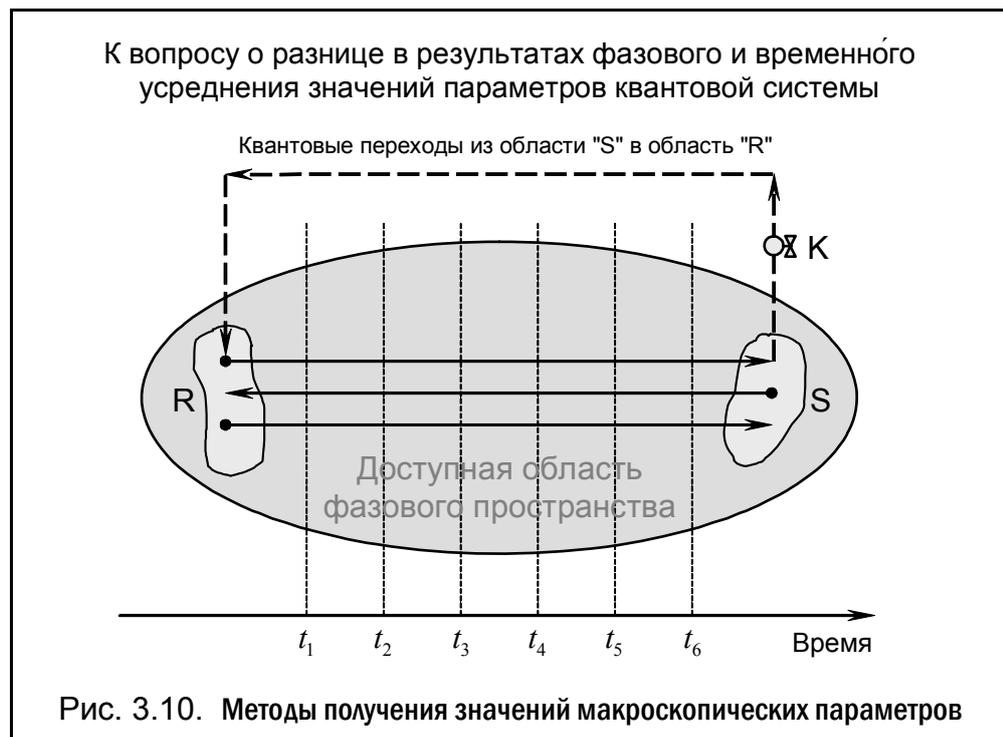
Например, парашютист, испытывающий состояние свободного падения в затяжном прыжке (самопроизвольный процесс, сопровождающийся возрастанием энтропии),

для повторения своих ощущений должен сначала опять подняться над Землёй на каком-нибудь летательном аппарате, затрачивая некоторую энергию на совершение этого «антиэнтропийного» процесса. Однако, ранее была описана возможность неопределённо долго пребывать (причём, без каких-либо затрат энергии) в состоянии самого настоящего падения (невесомость), для чего необходимо лишь двигаться по орбите космического спутника Земли с надлежащей скоростью. С точки зрения «ортодоксального парашютиста» само допущение существования такого процесса — является возмутительной профанацией святого принципа "любишь кататься, люби и саночки возить".

Приведённые образные примеры имеют, как это не покажется странным, самое прямое отношение к следующему важному обстоятельству: перемещение задвижки "В" в изображённом на рис. 3.5 (см. стр. 73) устройстве вызывает уменьшение вероятности пребывания физической системы в текущем стационарном макросостоянии, причём данный процесс не требует энергозатрат на соответствующее уменьшение энтропии. Для понимания вышесказанного необходимо разобраться в причинах того, почему в изучаемых квантовых системах значения макроскопических параметров зависят от вида статистического усреднения, в результате которого они получены:

- **временного усреднения**, требуемого самим определением указанных параметров;
- **фазового усреднения**, дающего корректные результаты лишь в случае заведомой справедливости микроканонической гипотезы.

Рассмотрим рис. 3.10, на котором символически изображена совокупность всех возможных видов элементарных переходов, осуществляемых *внутри* доступного фазового пространства некоторой физической системы. Фазовые траектории данных переходов начинаются и заканчиваются в выделенных областях, соответствующих изоэнергетическим макросостояниям "R" и "S". Как видно из рисунка, переходы из области "R" в область "S" случаются чаще, чем в обратном направлении. Это означает наличие определённого направленного потока внутри фазового пространства, т. е. в системе существуют релаксационные процессы, сопровождаемые повышением уровня энтропии.



Если перемещение точки, изображающей состояние системы, происходит только внутри доступного ей фазового пространства по непрерывной траектории, то такая система является эргодической. В данном случае микроканоническая гипотеза справедлива, и результаты вышеописанного временного и фазового усреднения — тождественны друг другу. При этом фазовое усреднение, используемое аппаратом статистической физики, осуществляется как обобщение параметров движения микрочастиц системы в некоторые фиксированные мгновения времени¹, не имеющие какой-либо протяжённости (своего рода, «фотоснимки» фазового состояния). Совершенно очевидно, что если некоторый перенос внутри фазового пространства (например, из области "R" в область "S") имеет место для эргодической системы, то её наблюдаемое макросостояние следует считать нестационарным (в узком смысле), так как макроскопические параметры этой системы (включая энтропию) — будут изменяться с течением времени.

Представим теперь, что изображённое на рис. 3.10 фазовое пространство принадлежит неэргодической системе. Причём в данном случае фазовая траектория не только может иметь разрывы первого рода², но также допускается существование *источников* и *стоков* внутри фазового пространства, т. е. дивергенция векторного поля фазовых траекторий — не обязана всегда быть равной нулю.

Допустим также, что в области "R" фазового пространства имеются источники фазовых траекторий, а в области "S" существуют некие стоки этих траекторий. В классических системах, состояние которых является строго определённым для любого момента времени, наличие таких свойств не допускается в принципе. Однако в квантовых системах, как уже об этом подробно говорилось в настоящей работе, возможна своего рода «прямая переброска» состояний непосредственно из одной области фазового пространства в другую, причём указанную «переброску» нельзя трактовать как перемещение соответствующей точки *внутри* фазового пространства по некоторой конкретной траектории, т. е. через последовательно минуемые промежуточные положения.

Такая «переброска» заключается в том, что в результате индетерминированной редукции пакета вероятностей, имеющей место, например, в процессе дифракции квантовой частицы, точка, описывающая состояние соответствующей одночастичной системы, просто «исчезает» из одной области подпространства импульсов своего фазового μ -пространства, и потом сразу «появляется» в другой его области. Логически эту ситуацию можно трактовать, как перемещение состояния системы между различными областями доступного ей фазового пространства, осуществляемое как бы за пределами самого этого пространства³. Разумеется, одно только наличие разрывов фазовых траекторий ещё не гарантирует появление источников и стоков внутри фазового пространства. Если в пределах некоторой области средние вероятности исчезновения и возникновения фазовых траекторий — одинаковы (например, при внутриобъёмном дифракционном рассеянии квантовых частиц), то это никак не скажется на макроскопических свойствах физической системы. В иных случаях (дифракционное рассеяние квантовых

¹ На рис. 3.10 такие моменты времени обозначены как t_1, t_2, \dots, t_6 .

² Понятно, что в любом ограниченном фазовом пространстве наличие каких-либо разрывов *второго* рода — невозможно.

³ В отличие от ранее упоминавшейся «нуль-транспортировки» из фантастических романов, данная квантовая «нуль-транспортировка» осуществляется не в пространстве геометрических координат, а в подпространстве импульсов фазового пространства.

частиц на поверхности) возможно возникновение «не траекторного» постоянно направленного процесса переноса в подпространстве импульсов системы, который будет компенсировать, так сказать, «классические» процессы переноса, реализуемые *внутри* доступного системе фазового пространства (см. рис. 3.10 на стр. 81).

Поскольку время не входит в число измерений фазового пространства, *временное* усреднение параметров системы учитывает *все* протекающие во времени физические процессы, в том числе и процессы квантовой переброски между областями "R" и "S", хотя формально они реализуются за пределами доступного фазового пространства. При осуществлении же процедуры *фазового* усреднения любые процессы квантовой «нуль-транспортировки» остаются заведомо вне поля зрения, так как в расчёт принимаются лишь «мгновенные» (для t_1, t_2, \dots, t_6) состояния системы *внутри* фазового пространства.

Таким образом, единственно корректная процедура временного усреднения макропараметров трактует представленное на рис. 3.10 состояние физической системы, как состояние *глобального* равновесия, являющееся наиболее вероятным для заданных условий. Иначе говоря, система может пребывать в таком состоянии неопределённо долгое время, и всё это время в доступном ей фазовом пространстве будут иметь место постоянно направленные процессы переноса, компенсирующие друг друга в масштабе всей системы, но не на отдельных локальных уровнях. При этом значения всех макроэкономических параметров системы, включая и энтропию, остаются неизменными.

Если, например, в системе существуют области геометрического пространства, характеризующиеся неоднородной объёмной концентрацией частиц, то диффузионному процессу «рассасывания» таких неоднородностей может соответствовать квантовый процесс надлежащего видоизменения направления движения этих частиц (см. рис. 2.21 на стр. 55), что, в конечном итоге, компенсирует результаты диффузионных процессов, а значит и сохраняет во времени наличие описанного градиента концентрации.

Очевидно, что операция фазового усреднения, которая принципиально не может учесть наличие процессов квантовой переброски состояний (у таких процессов отсутствует «мгновенное фотографическое изображение»), не всегда способна адекватно описать состояние квантовой системы. Поэтому с точки зрения нынешнего аппарата статистической физики, который использует метод фазового усреднения, изображённый на рис. 3.10 релаксационный процесс является неравновесным. Он должен либо затухнуть со временем (по достижении максимального значения энтропии), либо требовать для своего поддержания каких-либо действий, направленных на компенсационное уменьшение энтропии системы. В рамках классической статистической физики этот компенсационный процесс можно организовать единственно только «протащив» систему обратно из области "S" в область "R" *через внутренний объём* доступного системе фазового пространства, а на выполнение такого действия, как хорошо известно, необходимо затратить энергию. Собственно, эти энергозатраты и означают знаменитые компенсации, наличие которых строго обязательно с точки зрения второго закона термодинамики, и которые, например, ограничивают эффективность цикла Карно.

В заключение данной подглавы отметим, что изображённый на рис. 3.10 кран "K" является, своего рода, символическим функциональным аналогом задвижки "B", приведённой на схеме теплового двигателя с дискретным циклом (см. рис. 3.5 на стр. 73). Перемещение указанной задвижки способно, подобно крану "K", либо открыть заполняющую систему частицам газа «обходной» путь квантового перехода между различными областями фазового пространства (дифракция), либо перекрыть эту возможность.

Второй закон термодинамики

Ранее уже неоднократно указывалось на то, что H -теорема статистической физики является функциональным аналогом второго закона термодинамики. На этом основании делался вывод о том, что те особые физические процессы, корректное описание которых невозможно с применением аксиоматических принципов статистической физики, автоматически оказываются и «вне зоны ответственности» второго закона термодинамики. Следовательно, например, теплоэнергетические устройства, работа которых реализована с использованием вышеуказанных физических процессов, не подходят под определение так называемых «вечных двигателей второго рода».

Покажем теперь, что данный вывод непосредственно следует из ограничительной части, неявным образом присутствующей в используемой термодинамикой понятии *температуры*. Согласно так называемому «нулевому началу термодинамики», температура декларируется как особый параметр равновесного или квазиравновесного состояния физической системы, причём данный параметр по определению обязан иметь одинаковое значение для всех частей этой системы [03, стр. 17]. Такая температура может быть описана лишь в терминах скалярной величины, не зависящей от выделенных угловых направлений в геометрическом пространстве¹ (см. рис. 3.3, стр. 71). Проиллюстрируем вышесказанное на примере двух типичных определений второго закона:

- *Уильям Томсон (лорд Кельвин)*: "Невозможен процесс, единственный результат которого состоял бы в поглощении теплоты от нагревателя и полного преобразования этой теплоты в работу".
- *Рудольф Клаузиус*: "Невозможен процесс, единственный результат которого состоял бы в переходе энергии от более холодного тела к более горячему".

Терминология, использованная в формулировках Кельвина и Клаузиуса, однозначно предполагает скалярный² характер температуры. Действительно, только в этом случае имеют смысл какие-либо соотношения температур, выраженные в форме неравенств: «нагреватель – холодильник», «более холодное тело – более горячее тело»³. Таким образом, даже само определение понятия температуры, используемое термодинамикой, в значительной мере ограничивает применимость этой научной дисциплины.

Возвращаясь от термодинамики вновь к статистической физике, заметим, что кинетическая энергия теплового движения частиц рабочего тела в любом случае не может быть преобразована какой-либо машиной в другие формы энергии в отсутствие некоторой *разницы* температур. Однако для тензорных температур ненулевого ранга эта разница может быть достигнута не только за счёт изменения теплосодержания рабочего тела, но и вследствие перераспределения уже имеющейся кинетической энергии теплового движения частиц между различными степенями их свободы (см. рис. 3.4, стр. 72).

¹ В статистической физике уже давно используется понятие анизотропной температуры. Но эта характеристика применяется лишь к описанию сугубо неравновесных процессов. Например, при анализе параметров состояния неравновесной плазмы вполне можно встретить такие определения, как "поперечная температура электронов" и т. п.

² Напомним, что всякая скалярная функция представляет собой тензор нулевого ранга.

³ Для тензоров ненулевого ранга соотношения типа неравенств – не имеют смысла. К объектам такого рода применимо лишь понятие *равенства в точке*, определённое, впрочем, только для тензоров, имеющих одинаковый тип, ранг и вес [25, стр. 499].

Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом

Предложим теперь схему особого теплового двигателя с непрерывным циклом. Есть основания считать, что практическая реализация такого устройства, использующего возможность изоэнергетического варьирования параметров наиболее вероятного макросостояния замкнутой системы, будет значительно более удобной, чем ранее рассмотренный вариант двигателя с дискретным циклом (см. стр. 70).

Описываемое теплоэнергетическое устройство с непрерывным циклом представляет собой термоэлектрогенератор, использующий в качестве «рабочего тела» газ электронов¹ проводимости в ограниченном полупроводнике. Работа генератора основана на предполагаемом термомагнитном эффекте, который проявляется в том, что хаотическое тепловое движение носителей заряда может быть преобразовано в определённо направленный электрический ток в отсутствие градиента термодинамических температур и других проявлений изначальной неравновесности (вроде потока фотонов и т. п.). Этот ток способен вызвать разделение зарядов в объёме полупроводникового образца. Разность потенциалов, возникающая как следствие таких процессов переноса, может быть использована для совершения полезной работы во внешней цепи. На выполнение данной работы затрачивается часть кинетической энергии теплового движения электронов проводимости, что, в конечном итоге, приводит к охлаждению всего кристалла образца.

Последовательно рассмотрим те процессы, благодаря которым в ограниченном образце полупроводникового материала становится возможным преобразование хаотического (теплового) движения носителей заряда в электрический ток постоянного направления, способный нарушить эквипотенциальность различных точек этого образца.

Однако сначала отметим следующее весьма важное обстоятельство: *статическое* электромагнитное поле, воздействующее на ограниченный (какими-либо стенками) объём газа заряженных частиц, вызывает внутри данного объёма целый ряд разнообразных дрейфовых процессов. Если указанный объём принадлежит равновесной замкнутой системе, для которой справедлива гипотеза о равновероятности всех доступных микросостояний, то в сумме все эти дрейфовые процессы переноса обязательно компенсируют друг друга. Причём такая компенсация будет иметь место не только в среднем по объёму, но также и в любой точке, находящейся внутри этого объёма газа.

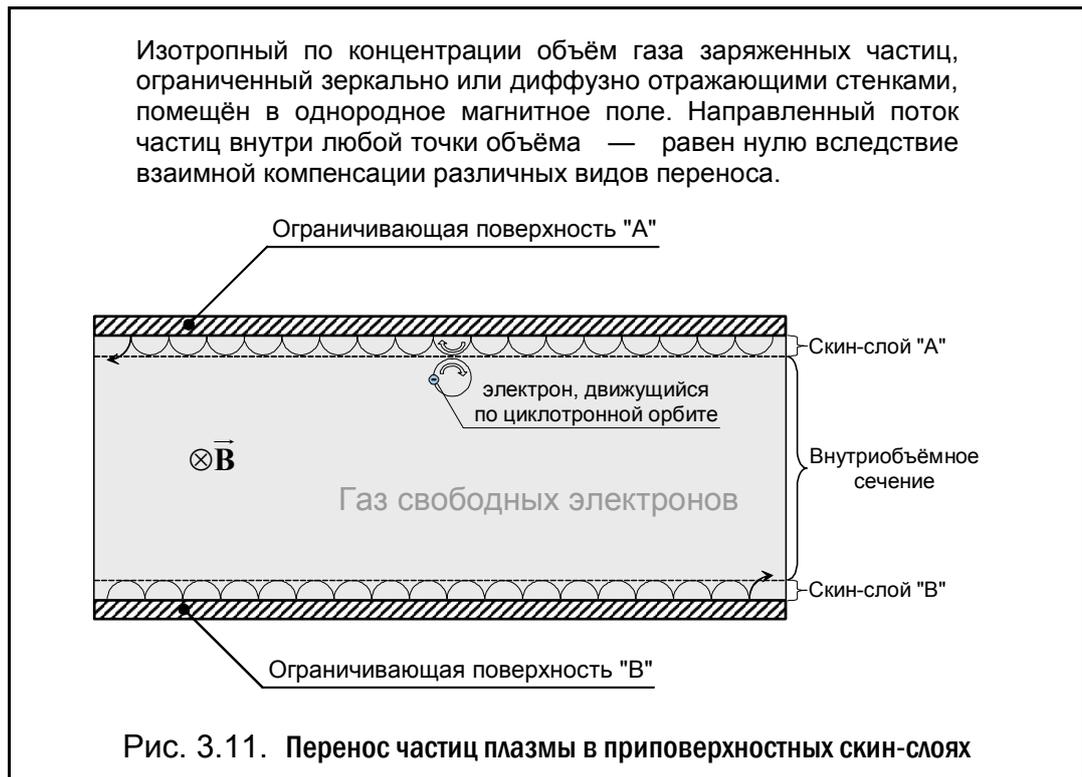
Перечислим основные виды вышеуказанных дрейфовых процессов переноса, возникающих в ограниченном объёме газа заряженных частиц при наличии внешнего статического электромагнитного поля:

S. Скин-дрейф. Движение заряженных частиц вдоль ограничивающих газ поверхностей. Такой вид дрейфа возникает вследствие воздействия на частицы магнитного поля, что в сочетании с эффектом отражения частиц от каких-либо границ приводит к периодическому изменению их фазы вращения по ларморовским (циклотронным) орбитам. Результатом наличия этих факторов является определённо направленный перенос частиц по циклоидоподобным траекториям внутри тонкой² области пристеночного пространства, именуемого *скин-слоем* (см., например, [47, стр. 79], [50, стр. 345-346] и др.). Характер отражения какой-либо частицы от поверхности (зер-

¹ Возможно также и «дырок», если они имеют достаточно высокую концентрацию и дрейфовую подвижность.

² Порядка диаметра ларморовской орбиты.

кальный или диффузный, но не дифракционный) влияет лишь на регулярность смены фазы вращения данной частицы по циклотронной орбите и, как следствие, на периодичность смещения центра кривизны её траектории во время движения в скин-слое. На рис. 3.11 дана графическая иллюстрация к тому, что собой представляет пристеночный перенос частиц в скин-слое. Особо отметим, что общее отсутствие переноса через открытые боковые поверхности обусловлено не просто взаимной компенсацией дрейфовых потоков в скин-слоях "А" и "В". Направленный перенос одновременно отсутствует и на любом локальном уровне, в том числе и внутри каждого отдельного скин-слоя¹.

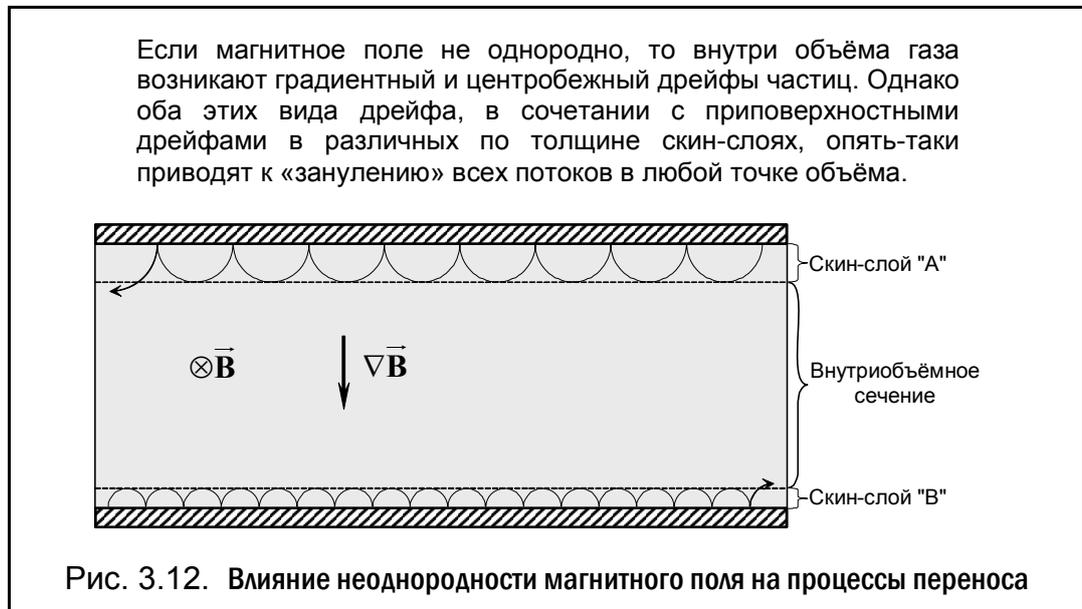


Г. Градиентный и центробежный дрейфы. Движение заряженных частиц, обусловленное наличием неоднородности у магнитного поля. *Градиентный дрейф* определяется неоднородной концентрацией силовых линий магнитного поля в геометрическом пространстве, что вызывает изменение радиуса кривизны траектории движущейся в таком поле частицы при прохождении этой частицей различных фаз вращения по циклотронной орбите [47, стр. 36-37, 80-81]. Причиной возникновения *центробежного дрейфа* является кривизна силовых линий неоднородного магнитного поля², в результате чего при винтовом движении вдоль этих линий частица испытывает дополнительное воздействие центробежных сил [47, стр. 38]. Проявления градиентного и центробежного дрейфа — тесно связаны между собой. Поэтому

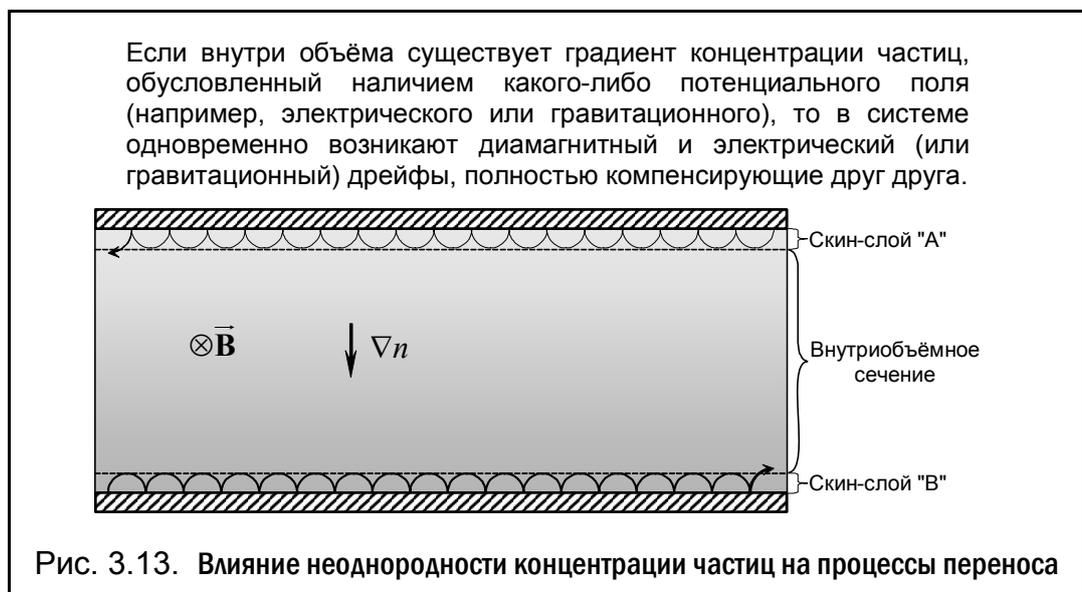
¹ Для понимания механизма этой компенсации необходимо наряду с эффектами скин-дрейфа учитывать и внутриобъемное движение частиц по циклотронным орбитам.

² Если существует *неоднородность концентрации* силовых линий магнитного поля, то в обязательном порядке имеет место и *кривизна* данных линий: оба таких проявления неоднородности строго связаны между собой как качественно, так и количественно.

корректное рассмотрение процессов переноса такого рода обязательно должно выполняться совместно друг с другом. На рис. 3.12 изображена картина различных видов дрейфа, возникающих в ограниченном объеме газа заряженных частиц в результате воздействия на этот объем неоднородного внешнего магнитного поля. Все процессы переноса, как и в предыдущем случае, точно компенсируют друг друга в любой точке заполненного газом геометрического пространства.



Н. Диамагнитный и электрический (или гравитационный) дрейфы. На рис. 3.13 можно увидеть иллюстрацию к указанным видам переноса.



Появление *диамагнитного дрейфа* обусловлено наличием градиента объемной концентрации заряженных частиц в сочетании с внешним магнитным полем (вектор градиента концентрации не должен быть коллинеарен вектору магнитной индукции) [47, стр. 76-79, 335]. Если предметом рассмотрения является равновесная замкнутая

система, для которой справедлива аксиоматика статистической физики, то существование постоянного во времени градиента концентрации частиц газа необходимым образом должно быть связано с присутствием некоторого внешнего потенциального поля, например, электрического или гравитационного. Одновременное воздействие на заряженные частицы магнитного поля и какого-либо из потенциальных полей (их векторы также не должны быть коллинеарны) вызывает в системе соответствующий вид переноса, например, электрический или гравитационный дрейф [47, стр. 31-34]. Как и во всех ранее рассмотренных ситуациях, здесь тоже в каждой точке заполненного газом объёма существует детальный нулевой баланс различных по своему происхождению потоков частиц.

Подведём итог вышесказанному. Пусть замкнутая физическая система, содержащая ограниченный объём газа заряженных частиц, пребывает в своём наиболее вероятном (равновесном) макроскопическом состоянии. Допустим также, что данную систему можно с одинаковой вероятностью обнаружить в любом из доступных ей микросостояний, образующих указанное равновесное макросостояние. Тогда справедливо будет утверждать, что никакое внешнее статическое электромагнитное поле, независимо от его конфигурации, не способно вызвать появление в этой системе постоянно направленных (стационарных) процессов переноса, наличие которых приводило бы, в свою очередь, к возникновению ненулевой разности потенциалов между различными точками заполненного газом объёма.

Это отнюдь не означает, что каждому конкретному виду дрейфа в описанной физической системе *количественно* соответствует некий другой, «парный» ему, вид дрейфа, имеющий строго такую же интенсивность, но противоположное направление. На самом деле в ходе компенсации проявлений переноса, что имеет место в каждой точке газового объёма, одновременно принимают участие практически все наличествующие в системе дрейфовые процессы. Проиллюстрируем это двумя следующими примерами:

- Градиент объёмной концентрации частиц в системе приводит не только к существованию диамагнитного дрейфа, но также служит причиной возникновения разницы в плотностях потоков частиц, движущихся в пространственно «разнесённых» скин-слоях (см. рис. 3.13, где плотность частиц в скин-слое "В" выше, чем в слое "А"; при этом сами слои могут иметь одинаковую толщину).
- Неоднородность магнитного поля не только вызывает появление градиентного и центробежного дрейфов, но и меняет параметры процессов переноса, реализуемых за счёт скин-дрейфов, так как неодинаковая величина магнитной индукции в различных точках объёма системы соответствующим образом влияет на толщину разных скин-слоёв (см. рис. 3.12) и на характер движения частиц в этих скин-слоях.

Для гарантированного «зануления» всех потоков частиц в каждой точке газового объёма принципиальным является не просто перечень всех тех разновидностей дрейфа, которые присутствуют в данной системе, а правомерность наличия того или иного конкретного вида дрейфа с точки зрения соблюдения корректности аксиоматических принципов статистической физики. Приведём пример того, как влияет на баланс процессов переноса такое исключение из системы одного определённого типа дрейфа, при котором механизм этого исключения не связан с нарушениями указанной аксиоматики.

Пусть у нас имеется физическая система, содержащая ограниченный объём газа заряженных частиц. На данный газ воздействует неоднородное статическое магнитное поле, вызывающее внутри объёма такие виды переноса, как скин-дрейф, градиентный

дрейф и центробежный дрейф частиц. Как уже говорилось, при условии выполнения в системе аксиоматического принципа равновероятности изоэнергетических микросостояний все перечисленные виды дрейфа — точно компенсируют друг друга в каждой точке газового объёма.

Изменим теперь конфигурацию системы так, чтобы исключить из неё проявления только одного вида дрейфа, например, центробежного. Этого можно добиться путём уменьшения пространственной протяжённости геометрического объёма газа в направлении, коллинеарном вектору магнитной индукции, до величины, которая существенно меньше типичной длины волны де Бройля составляющих газ частиц. В результате динамика системы превращается из трёхмерной (3D) в двумерную (2D), так как становится невозможным любое перемещение частиц в направлении, совпадающем с направлением силовых линий магнитного поля. Но если исключено движение частиц вдоль силовых линий магнитного поля, то исключено и какое-либо проявление процессов переноса, связанных с кривизной этих силовых линий (центробежный дрейф).

Тем не менее, никакой «разбалансировки» процессов переноса, связанных с исчезновением из системы, казалось бы, только одного дрейфового явления, не произойдёт. Дело в том, что в трёхмерной (3D) системе неоднородное магнитное поле является причиной своего рода неявного диамагнитного дрейфа, существование которого, однако, не связано с наличием реального градиента объёмной концентрации частиц. Такой особый эффект обусловлен тем, что при винтовом трёхмерном движении частиц вдоль искривлённых силовых линий магнитного поля те их фазы ларморовских орбит, которые лежат в области более сильного магнитного поля, *кажутся*¹ расположенными более плотно, чем участки орбит, находящиеся в области с более слабой индукцией. При исключении в двумерной системе самой возможности движения частиц вдоль линий магнитной индукции — исчезает не только эффект центробежного дрейфа, но и проявления указанного неявного диамагнитного дрейфа, что, в конечном итоге, приводит к сохранению нулевого баланса всех процессов переноса.

Совсем другая ситуация возникает в том случае, когда каким-либо образом возможно «чистое» удаление из замкнутой системы некоторого отдельного вида дрейфа, выполняемое без существенного изменения других видов переноса. Тогда становится принципиально допустимым такое равновесное (наиболее вероятное) макроскопическое состояние данной системы, при котором в ней будет иметь место определённый дисбаланс дрейфовых процессов. Однако указанная возможность является реализуемой лишь за границами применимости аксиоматических принципов статистической физики.

Попробуем привести вполне конкретный пример такой «дрейфовой» физической системы, поведение которой находится вне «зоны ответственности» аксиоматических принципов статистической физики. Принципы организации этой системы могли бы послужить функциональной основой для реализации особого теплового двигателя с непрерывным циклом, чему, собственно, и посвящена настоящая подглава.

Разумеется, на текущем этапе, посвящённом изложению общих принципов функционирования предлагаемой системы, можно было бы избежать какой-либо конкрети-

¹ Здесь приходится принимать во внимание весьма «тонкие» моменты, связанные, например, с тем, что в описываемых сложных ситуациях концентрация и параметры движения собственно частиц — не совпадают с соответствующими характеристиками их ведущих центров (геометрических центров кривизны траектории) [47, стр. 78-81].

зации физических свойств используемых материалов, характеристик электромагнитных полей и т. д. В анализируемой предметной области известны весьма типичные для математической физики примеры модельных подходов, которые предполагают предельно упрощённую процедуру выбора параметров исследуемых систем. Например, в так называемых «бильярдах Синая» вопросы эргодичности изучаются на динамических системах, состоящих из прямолинейно¹ движущихся твёрдых шариков, причём и масса, и скорость шариков, являются единичными и неизменными по величине, а характер их отражения от стенок бильярда считается зеркальным [37, стр. 144-145].

Тем не менее, необходимо учесть, что «дрейфовая» разновидность изучаемых систем имеет, по мнению автора, максимальные шансы на практическую реализацию. По данной причине математическое описание именно такого рода системы было положено в основу имитационной модели исследуемых процессов (см. главу "4. Имитационное моделирование исследуемых процессов", стр. 102). Поэтому было бы вполне логично уделить повышенное внимание конструктивным деталям «дрейфовых» систем.

Предметом рассмотрения здесь решено выбрать дрейфовые процессы, которые имеют место в электронно-дырочной плазме ограниченного образца полупроводникового монокристалла при наличии внешнего статического электромагнитного поля.

В качестве конкретного материала указанного образца был выбран беспримесный некомпенсированный антимонид индия (InSb), обладающий при температуре кипения жидкого азота ($T \cong 77.388^\circ K$) чрезвычайно высокой дрейфовой подвижностью своих основных носителей заряда — электронов проводимости: $\mu_n \approx 1200000 \text{ cm}^2/(B \cdot \text{c})$. Кроме того, есть три следующие обстоятельства, сильно упрощающие анализ динамики свободных носителей заряда именно в антимониде индия и при данной температуре:

- Скалярный (не тензорный) характер изотропной эффективной массы² электронов проводимости в InSb.
- Невырожденность электронного газа в чистом InSb при «азотной» температуре.
- При «азотной» температуре средняя длина свободного пробега электронов между актами релаксации их импульсов ($\ell \approx 5 \text{ mkm}$) примерно в 50 раз превышает длину волны де Бройля, соответствующую среднеквадратичной кинетической энергии частиц $\lambda \approx 0.1 \text{ mkm}$. Это даёт основания использовать при описании динамики электронов проводимости так называемую «смешанную» модель: акты релаксации импульсов рассматриваются как индетерминированные квантовые процессы, а всё остальное время динамика электронов принимается тождественной движению классических частиц с надлежащим образом перенормированной эффективной массой³.

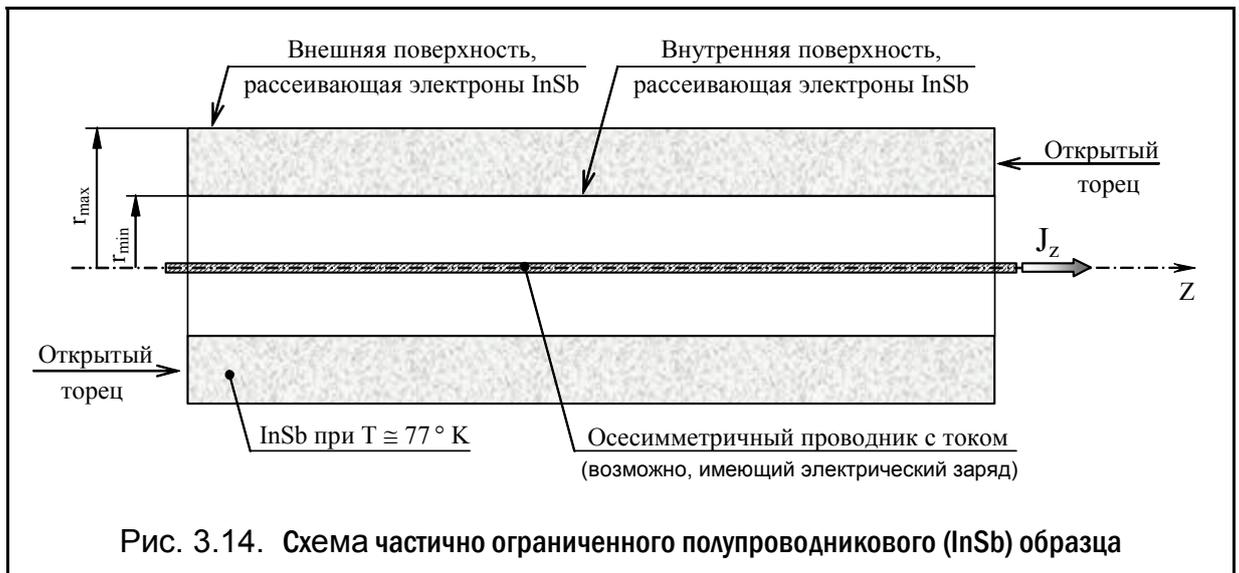
На рис. 3.14 изображена схема частично ограниченного полупроводникового образца, используемая в ходе дальнейшего рассмотрения. Данный образец представляет собой *не замкнутую* систему и имеет вид полой трубы с открытыми торцами, внешняя и внутренняя поверхности которой взаимно коаксиальны и представляют собой прямые

¹ В промежутках времени между соударениями шариков со стенками бильярда.

² Почти совпадают также значения омической и циклотронной эффективных масс InSb.

³ Иначе говоря, рассеяние частиц представляется как процесс их перехода между различными «чистыми» состояниями в подпространстве импульсов [06, стр. 612-613] (подобно дифракции Фраунгофера, с использованием понятия S-матрицы рассеяния).

круговые цилиндры с радиусами, соответственно, r_{min} (внутренняя поверхность) и r_{max} (внешняя поверхность). Стенки этой трубы (т. е. пространство между внешней и внутренней поверхностями) выполнены из беспримесного монокристалла антимонида индия, находящегося при температуре кипения жидкого азота (для нормального атмосферного давления: $T \approx 77.388^\circ K$). Источником магнитного и, возможно, радиального электрического поля в исследуемой системе служит токоведущий линейный проводник круглого сечения, проходящий по оси симметрии вышеуказанной трубы из InSb.

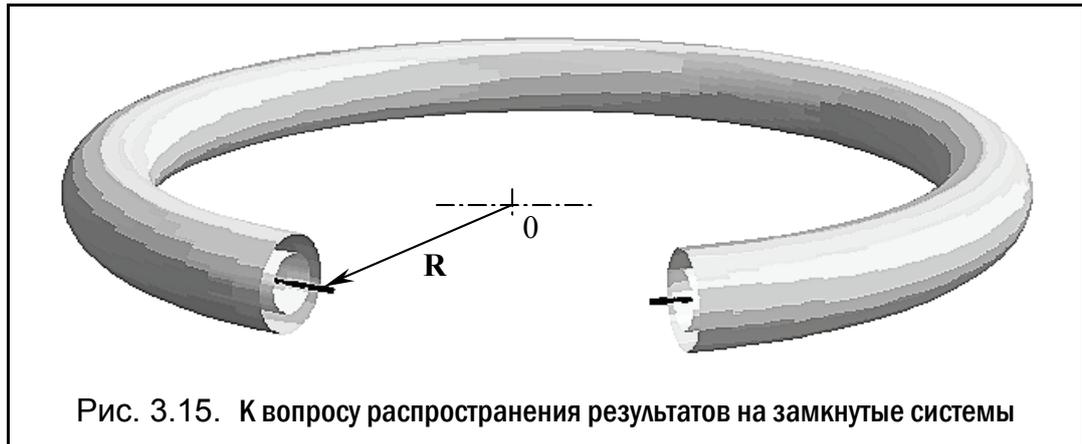


Выбор столь необычной конфигурации образца обусловлен тем, что рассматриваемая система позволяет, при необходимости, совершенно корректно моделировать наличие даже сильно неоднородного электромагнитного поля. Описание возникающих при этом дрейфов (электрического, градиентного и центробежного) — лежит далеко за границами применимости метода возмущений, обычно используемого, например, в теории плазмы. Тем не менее, ранее приведённые рассуждения о полной взаимной компенсации всех процессов переноса в любой точке внутреннего объёма системы остаются по-прежнему справедливыми и для таких существенно нелинейных вариантов дрейфа¹. Впрочем, случай достаточно однородного магнитного поля может быть легко реализован в описанной системе путём надлежащего варьирования геометрии образца, для этого необходимо лишь минимизировать соотношение: $\varepsilon = (r_{max} - r_{min})/r_{min} \rightarrow +0$.

Уже обращалось внимание на то обстоятельство, что описываемый здесь частично ограниченный образец полупроводника представляет собой *не замкнутую* физическую систему (открытые торцы). Однако предметом рассмотрения настоящей работы является анализ наиболее вероятных (равновесных) макроскопических состояний, реализуемых в замкнутых системах. Тем не менее, предполагается, что данное обстоя-

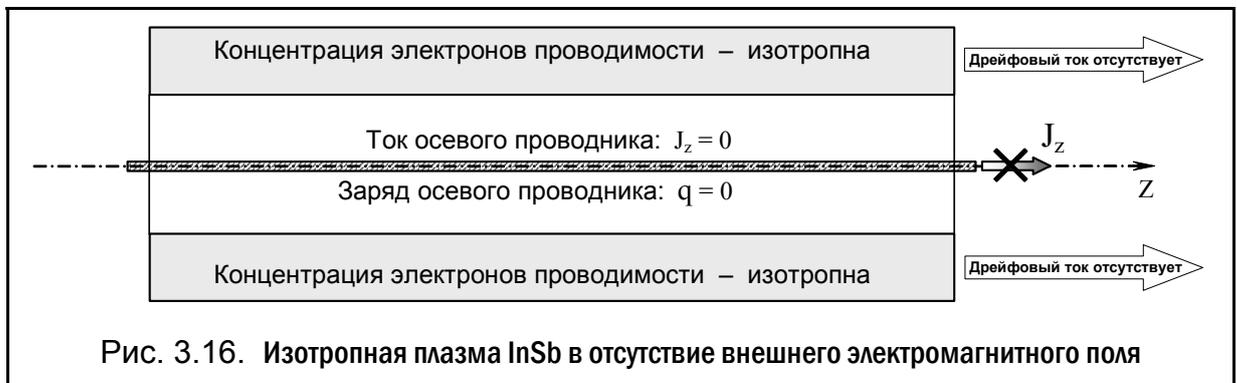
¹ Это обстоятельство даёт возможность использовать случай конфигурации с сильно неоднородным электромагнитным полем в качестве сложного комплексного теста по проверке адекватности математического описания изучаемой физической системы: если отражение электронов проводимости от внутренних поверхностей образца будет либо зеркальным, либо кнудсеновским, то какие-либо несбалансированные процессы переноса внутри объёма электронного газа — принципиально должны отсутствовать.

тельство — не принципиально, так как изображённый на рис. 3.14 образец в пределе можно считать произвольной частью именно замкнутой системы, состоящей из тора ограниченного объёма (см. рис. 3.15). Геометрия данного тора характеризуется пусть и очень большим, но всё же конечным отношением радиуса внешнего кольца R к радиусу образующей его трубы r_{max} : $R/r_{max} \gg 1$. Поскольку такая конфигурация не предполагает наличия каких-либо специальных граничных условий на торцах приведённого на рис. 3.14 образца, то вполне корректно будет распространить получаемые для этого образца результаты и на всю замкнутую тороидальную систему в целом.



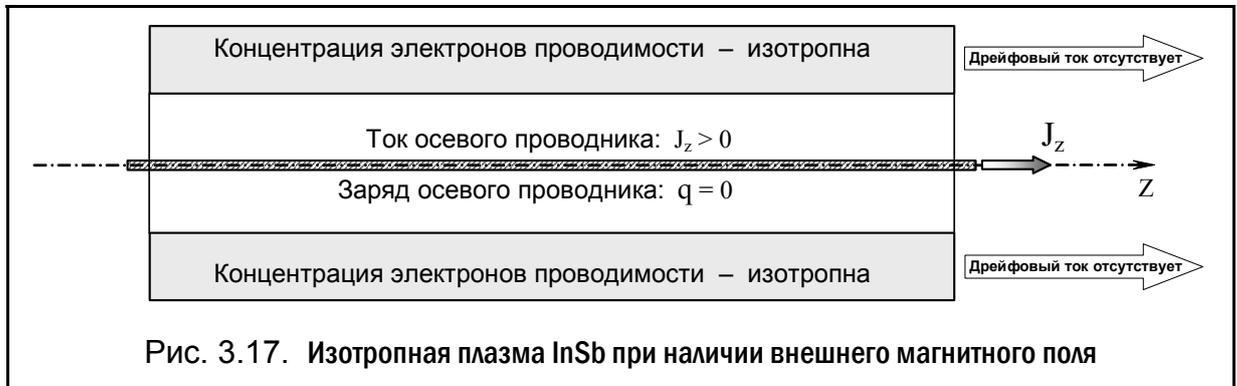
Проанализируем теперь поведение изображённой на рис. 3.14 физической системы для различных вариантов её организации. Рассмотрим сначала ранее обсуждавшиеся ситуации, которые соответствуют случаю соблюдения в системе аксиоматических принципов статистической физики, а именно: характер отражения электронов проводимости от внутренних поверхностей образца является либо зеркальным, либо кнудсеновским. Поэтому первоначально приготовленное диффузное внутриобъёмное распределение электронного газа остаётся таковым и в последующие моменты времени.

На рис. 3.16 приведена совершенно очевидная тривиальная ситуация, когда на классически равновесный газ электронов проводимости не воздействует какое-либо электромагнитное поле: осевой проводник является электрически нейтральным; ток по нему — не течёт. Естественно, что в данном случае любые стационарные процессы переноса, направленные, например, вдоль оси симметрии образца, будут отсутствовать.

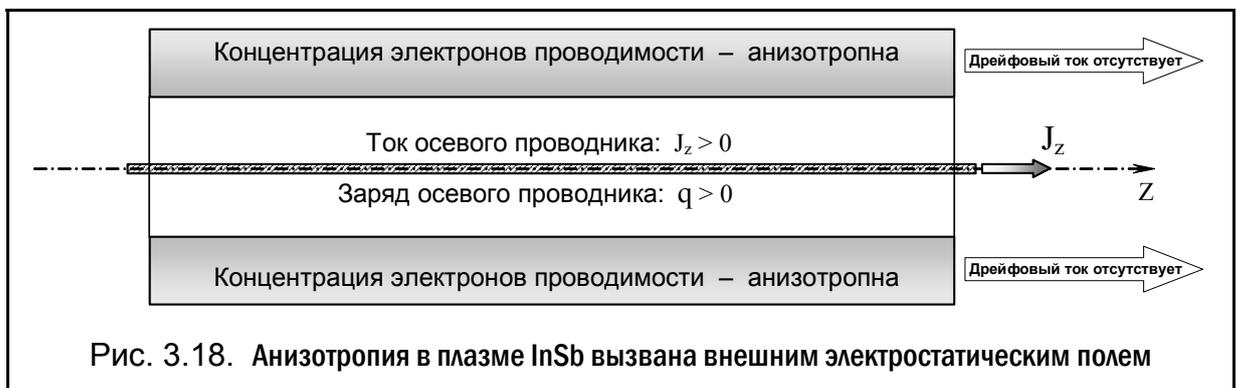


Ситуация никак не меняется, если теперь воздействовать на материал образца внешним статическим магнитным полем, для чего по осевому проводнику пропускает-

ся электрический ток¹. Из содержания рис. 3.17 видно, что наличие указанного магнитного поля (возможно, сильно неоднородного) — никак не изменяет наиболее вероятного макросостояния анализируемой системы. В частности, снова отсутствуют определённо направленные процессы переноса электронов вдоль оси симметрии образца.



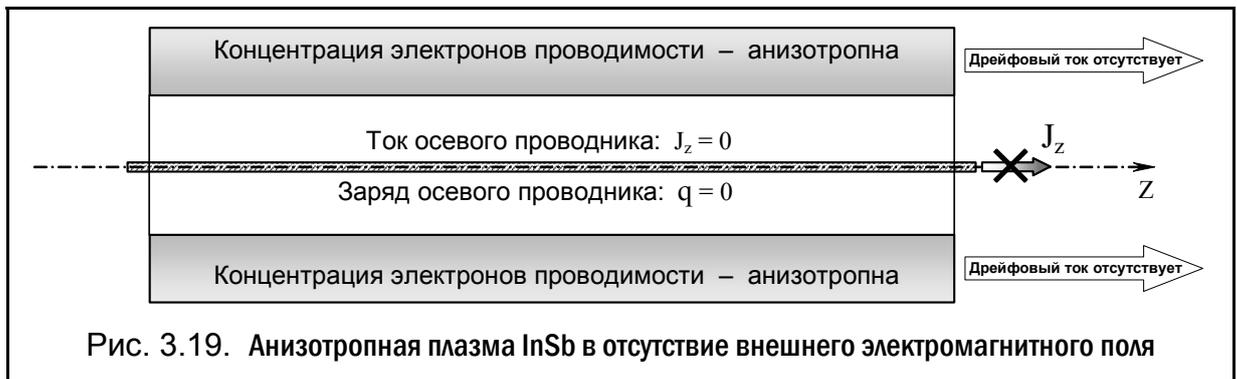
Всё остаётся по-прежнему и в том случае, когда осевой проводник с током получает некий избыточный электрический заряд какого-либо знака (см. рис. 3.18). Создаваемое указанным проводником статическое электромагнитное поле может при этом являться причиной возникновения «полного набора» всех ранее рассмотренных типов дрейфовых явлений, вероятно реализуемых, к тому же, весьма нелинейным образом (если изображённые на рисунке геометрические пропорции r_{min}/r_{max} имеют реальный характер). Тем не менее, несмотря на то, что наличие потенциального электрического поля приводит к появлению в образце радиального градиента концентрации частиц, все «добавляемые» благодаря этому виды переноса (диамагнитный и электрический дрейфы) — не влияют на нулевой баланс потоков электронов внутри объёма системы.



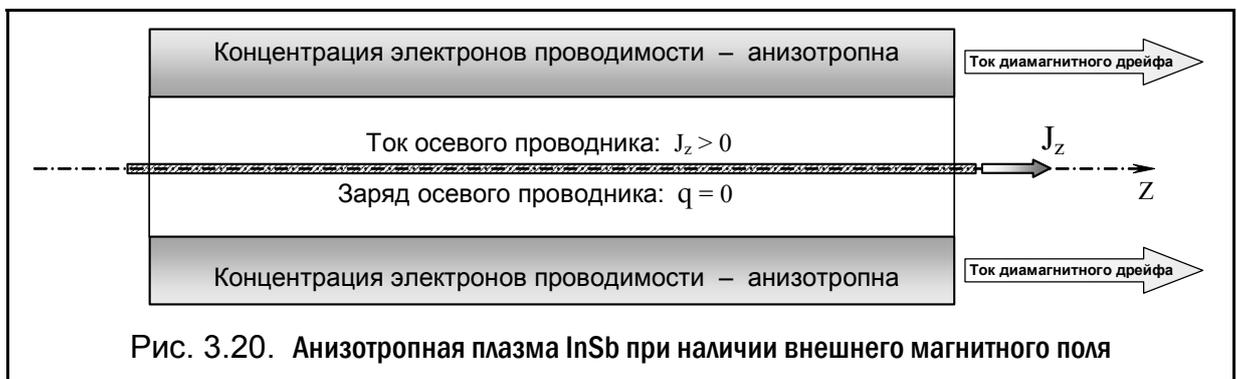
Рассмотрим теперь вариант реализации физической системы, когда имеет место дифракционное рассеяние электронов проводимости на какой-либо из поверхностей

¹ Если вернуться на минуту к рассмотрению изображённой на рис. 3.15 замкнутой тороидальной системы, то для определённости можно считать, что кольцевой проводник, расположенный по оси тора, обладает сверхпроводящими свойствами (это, как известно, является теперь достижимым уже и при «азотных» температурах). Иначе говоря, поддержание тока в указанном проводнике — принципиально не связано с какими-либо затратами энергии (по крайней мере, в стационарном режиме).

(r_{max} или r_{min}) образца. В этом случае становится возможным такое наиболее вероятное макроскопическое состояние электронного газа, при котором этот газ в отсутствие внешних потенциальных полей будет иметь неоднородную пространственную концентрацию. На рис. 3.19 изображена ситуация, когда рассеяние электронов на поверхности с радиусом r_{max} осуществляется по закону Кнудсена (например, диффузно), а на поверхности с радиусом r_{min} — по законам волновой механики. Благодаря этому внутри объёма образца возникает устойчивый радиальный градиент концентрации частиц.



Если теперь воздействовать на образец InSb внешним статическим магнитным полем (см. рис. 3.20), то в полученной системе возникнут все те же разновидности переноса, что и в изображённом на рис. 3.18 случае, но с одним важным исключением: *электрический дрейф* здесь будет отсутствовать. Поскольку ток диамагнитного дрейфа не будет уравниваться "парным ему" током электрического дрейфа, то возникающий при этом несимметричный отклик приведёт к появлению стационарного процесса переноса электронов проводимости, определённо направленного вдоль оси "Z" образца.



Описанное сугубо умозрительное заключение о дисбалансе процессов переноса было тщательно проверено и нашло своё полное подтверждение в ходе осуществления надлежащих имитационных экспериментов (см. главу "4. Имитационное моделирование исследуемых процессов", стр. 102). Теперь рассмотрим случай, когда изображённый на рис. 3.20 образец – не является частью «замкнутого на самого себя» тора (см. рис. 3.15), а представляет собой элемент линейной системы *ограниченной длины*. Тогда движущийся вдоль оси симметрии "Z" поток электронов должен со временем вызвать разделение зарядов внутри такой системы, что приведёт к возникновению соответствующей составляющей электрического поля. Очевидно, что получаемая при этом разность потенциалов может быть использована для совершения работы во внешней цепи.

В ходе имитационных экспериментов были также проанализированы и более сложные варианты организации физических систем. На рис. 3.21 изображена ситуация, когда наряду с градиентом концентрации частиц, обусловленным дифракционным характером рассеяния электронов на границах образца, одновременно имеется и градиент, вызванный наличием потенциального (электрического) поля.

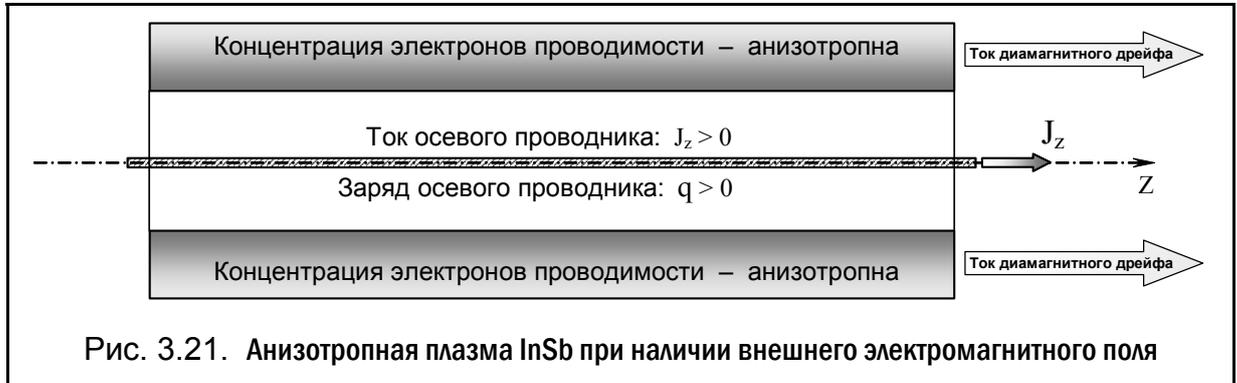


Рис. 3.21. Анизотропная плазма InSb при наличии внешнего электромагнитного поля

В реальном полупроводниковом образце наличие такого электрического поля может быть вызвано, например, приповерхностным изгибом зон или существованием радиального градиента концентрации у достаточно плотного электронного газа. При рассмотрении столь подробных моделей возникают проблемы уже сугубо технического (не принципиального) плана: необходимость учёта самосогласованного характера электромагнитного поля в системе (его уже нельзя считать только внешним); «экранирование» микрорельефа поверхности потенциальным барьером, когда дифракционное рассеяние частиц заменяется их зеркальным отражением [50, стр. 341-342], и т. д.

На рис. 3.22 дан вариант схемы теплоэнергоустановки с непрерывным циклом.

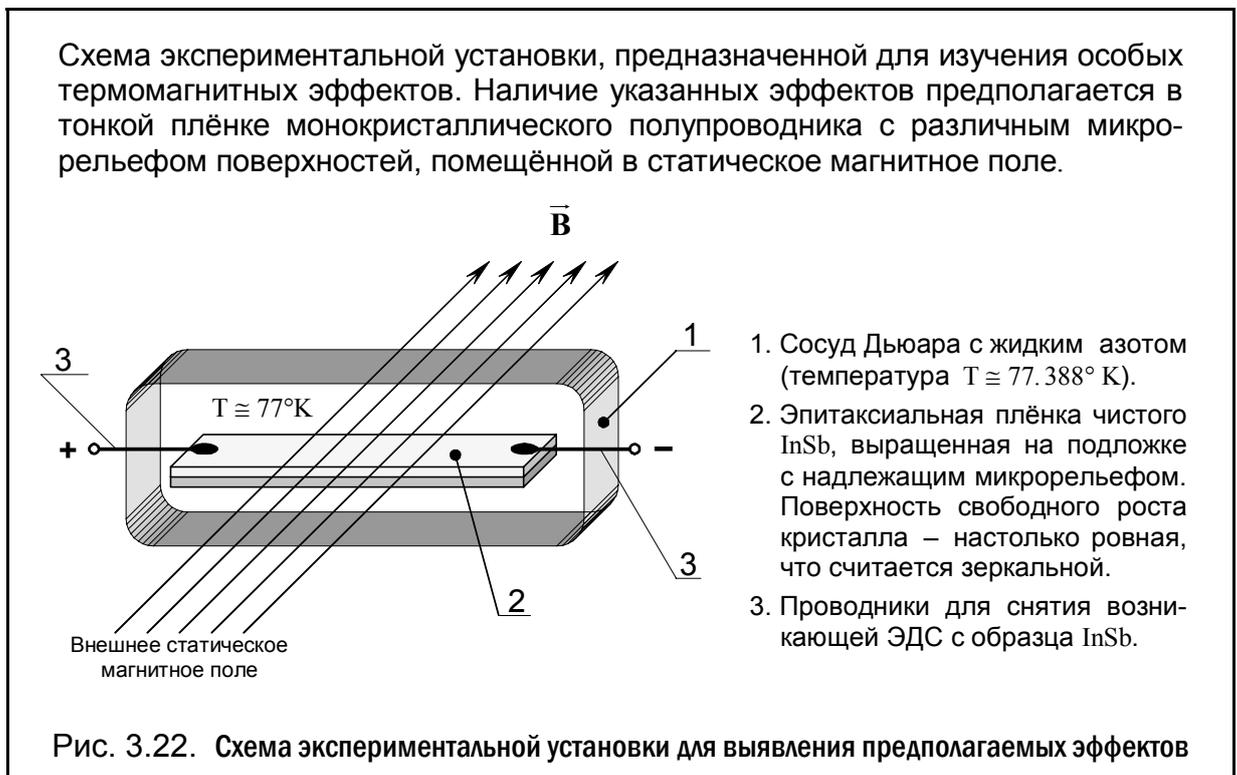


Рис. 3.22. Схема экспериментальной установки для выявления предполагаемых эффектов

В заключение этой подглавы ещё раз дадим краткую оценку тех терминов, которые в настоящее время принято использовать для описания различных состояний замкнутых физических систем. Здесь имеется в виду уточнение определений таких понятий, как *энтропия* и *статистическое равновесие*.

Рассмотрим замкнутую систему, изображённую на рис. 3.23. Данная система "3" содержит в своём составе теплоэнергетическую установку "1", преобразующую кинетическую энергию "Q" теплового движения частиц окружающей среды в какой-либо вид «ликвидной» энергии (например, в электроэнергию). Полученная энергия полностью (т.е. без всякого аккумулирования) используется потребителем "2" для выполнения некоторых полезных действий в форме работы "A". В конечном итоге вся работа "A" вновь превращается в тепло "Q", после чего цикл в системе "3" — замыкается.

Замкнутая физическая система пребывает здесь в равновесном состоянии, если это состояние определить как наиболее вероятное стационарное состояние данной системы. Если же обычно предполагаемое понятие «стационарности *в узком смысле*» (любые параметры системы не должны зависеть от времени) заменить математически полным определением, именуемым как «стационарность *в широком смысле*», то полученная формулировка равновесного состояния будет корректна и для тех случаев, когда преобразование и потребление энергии осуществляется дискретным образом.

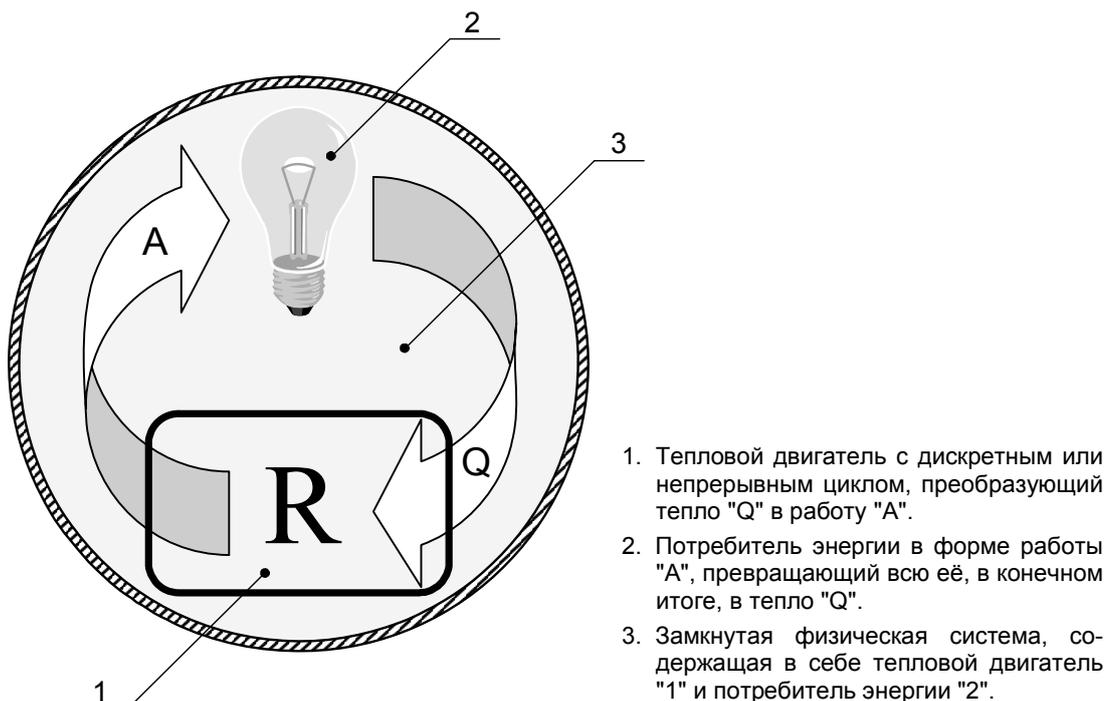


Рис. 3.23. Схема замкнутой системы, находящейся в состоянии глобального равновесия

В подглаве "Энтропия реальных физических систем" (стр. 78) уже говорилось, что непрерывное функционирование теплоэнергетических установок, которые являются предметом рассмотрения данной работы, характеризуется постоянным уровнем энтропии рабочего тела в этих установках, — при том, разумеется, условии, что само понятие энтропии определено в математически полной форме (3.1). Кроме того, аксиоматически независимое понятие статистического равновесия в замкнутой системе должно быть определено не иначе, как её *наиболее вероятное стационарное макросостояние*.

Принимая во внимание указанные определения, изображённая на рис. 3.23. система "3" должна во время функционирования содержать в ней компоненты "1" и "2" характеризоваться как равновесная и обладающая постоянным уровнем энтропии.

Вышеприведённое утверждение не вызывает вопросов, если в качестве теплового двигателя "1" рассматривается теплоэнергетическая установка с *непрерывным* циклом, что предполагает неизменный во времени характер параметров рабочего тела внутри такой установки. Обычно используемая дефиниция стационарного процесса, как стационарного в так называемом *узком смысле*¹, подразумевает именно такую временную стабильность любых его характеристик.

Тем не менее, анализируемую систему (см. рис. 3.23) можно с полным правом называть равновесной и в том случае, когда тепловой двигатель "1" представлен теплоэнергетической установкой с *дискретным* циклом. Следует лишь вспомнить о том, что математически полное определение стационарного процесса, именуемого как стационарный в *широком смысле*², вообще говоря, не предполагает обязательной неизменности во времени значений параметров³ такого процесса.

Подведём итог: изображённая на рис. 3.23 система, строго говоря, является равновесной и обладает неизменной энтропией, что абсолютно не входит в противоречие с возможным наличием в этой системе определённо направленных (не флуктуационных) динамических процессов, анизотропных в пространстве и неоднородных во времени⁴.

О предпосылках, лежащих в основе текущего направления работ

Может показаться, что содержание подглавы "Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом" (см. её начало на стр. 85) является чрезмерно далёкой от реальности экстраполяцией на практику тех теоретических выводов, которые излагаются в настоящей работе. На самом же деле ситуация выглядит существенно иным образом.

В 1993 г. автором была найдена финансовая возможность заключения двух договоров⁵ с Физико-техническим институтом им. А. Ф. Иоффе Российской Академии наук (ФТИ РАН, Санкт-Петербург) на проведение работ по экспериментальному исследованию особых гальваномагнитных эффектов⁶. Данные исследования, которые в случае обоих договоров были идентичны по своим конечным целям, выполнялись двумя независимыми группами сотрудников ФТИ. Эти группы работали в различных по своему

¹ См. [09, стр. 389], [13, стр. 30-31], [16, стр. 339-343], [31, стр. 151], [33, стр. 304].

² См. [09, стр. 387], [13, стр. 30-31], [16, стр. 339-343], [31, стр. 128, 130], [33, стр. 257, 270, 298].

³ Для замкнутой физической системы понятие пребывания в стационарном (*в широком смысле*) состоянии связано с обязательным соблюдением двух следующих правил: закона сохранения импульса и закона сохранения энергии.

⁴ Многие современные астрофизические модели Вселенной, создаваемые, в том числе, с целью преодоления парадокса выдвинутой Клаузиусом «теории тепловой смерти», предполагают весьма схожий взгляд на понятие равновесного состояния систем.

⁵ Договоры № 7С/3 - 1297 и № 8С/3 - 431 от 15 февраля 1993 г., официально заключённые через научно-технический центр "Физимпекс" при ФТИ РАН.

⁶ Содержание данных работ не имеет прямого отношения к проекту "Euler".

приборному оснащению лабораториях и пользовались не совпадающими методиками проведения экспериментов.

При осуществлении работ объектами изучения являлись некие ранее неизвестные процессы переноса, которые, предположительно, могли иметь место в объёмных полупроводниковых образцах специальной геометрии, находящихся в неоднородном статическом магнитном поле.

Объёмные полупроводниковые образцы были изготовлены в геометрии дисков Корбино¹ из материала с очень высокой дрейфовой подвижностью электронов проводимости (беспримесный антимонид индия – InSb). Эти образцы помещались при комнатной температуре в статическое магнитное поле, источником которого в одном случае был биттеровский магнит с высокостабилизированным² электропитанием, а в другом — постоянный лабораторный магнит стационарного типа (с циклотрона ФТИ).

Те особые виды переноса, существование которых предполагалось при исходном планировании работ, по объективным причинам так и не были выявлены: в модельном описании изучаемых систем, как это выяснилось в дальнейшем, была допущена принципиальная неточность теоретического характера. Тем не менее, в процессе исследований обе лаборатории зафиксировали некие побочные эффекты, устойчиво воспроизводимые на разных образцах при широком варьировании техники осуществления экспериментов. Проявление данных эффектов заключалось в следующем.

При помещении полупроводникового образца в статическое магнитное поле между различными точками его поверхности возникала устойчивая разность потенциалов, способная вызвать небольшой ток во внешней нагрузке³. Иначе говоря, возникающее нарушение эквипотенциальности поверхности образца носило характер электродвижущей силы, способной совершить некоторую работу во внешней цепи. Величина получаемой ЭДС была очень мала (от 1.0 до 5.0 микровольт), но существенно больше среднеквадратичной погрешности производимых измерений (около 0.1 микровольта). Таким образом, фиксируемая разность потенциалов была статистически значимой величиной, отвечающей, например, простейшему эмпирическому методу проверки достоверности экспериментальных результатов, известному как «правило трёх сигм». Весьма продолжительные попытки экспериментаторов обеих лабораторий хоть как-то «отстроиться» от предполагаемых помех (микроволновые наводки, неомические контакты, различные проявления термо- и фотоэффектов, и т. п.) — так и не имели успеха. В итоговых отчётах фиксируемая ЭДС была определена, как "проявление гальваномагнитного эффекта неустановленной природы".

Вышеуказанное нарушение эквипотенциальности проявляло себя при одновременном совпадении следующих условий:

- Степень «замагниченности» основных носителей заряда в полупроводниковых образцах (для беспримесного InSb – это электроны проводимости) должна быть достаточно высокой: $\omega \cdot \tau \geq 1$, где ω - циклотронная частота носителей заряда во внешнем магнитном поле, τ - среднее время свободного пробега данных носителей.

¹ Диск Корбино — это образец, имеющий форму круглой шайбы с центральным отверстием. Кольцевые контакты размещаются на внешнем и внутреннем краях диска.

² Для исключения индуцированных наводок в цепях и нагрева образцов токами Фуко.

³ В отличие, например, от такой «вещи в себе», как контактная разность потенциалов.

- Вектор индукции внешнего статического магнитного поля должен иметь ненулевую компоненту¹ в плоскости, параллельной плоскости дисков Корбино (форма изготовления образцов). В экспериментах эта ситуация вначале реализовалась случайно (в дальнейшем она изучалась целенаправленно), — как следствие того, что при размещении одного из образцов в магнитном поле ось диска Корбино не была (вопреки техническому заданию) вполне коллинеарна вектору магнитной индукции.
- У исследуемых полупроводниковых образцов должен быть различный по своему характеру микрорельеф тех двух поверхностей, которые образуют плоскости дисков Корбино. В проводимых исследованиях это обстоятельство имело место благодаря тому, что у части объёмных образцов одна из плоскостей изготовленного диска Корбино совпадала с подложкой, на которой выращивался исходный монокристалл. Вторая же плоскость диска представляла собой поверхность свободного роста кристалла InSb. Возможно, что подложка имела некоторый микрорельеф, в то время как поверхность свободного роста кристалла была практически зеркально гладкой.

Описанные условия появления ЭДС в исследованных образцах — очень близки к тем требованиям, при выполнении которых, как уже предполагалось в подглаве "Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом", в ограниченных полупроводниках должны возникать процессы направленного переноса заряда (см., например, рис. 3.22 на стр. 95). Именно такого рода процессы послужили объектом имитационного моделирования (см. отдельную главу на стр. 102), в результате чего была ещё раз подтверждена возможность существования вышеуказанных термомагнитных эффектов.

К сожалению, описанные физические эффекты, обнаруженные в результате заказных экспериментов в ФТИ РАН, носят весьма слабый и нечёткий характер, что, вообще говоря, даёт возможность для весьма произвольного толкования их природы. По этой причине наличие указанных результатов, например, никоим образом не считается серьёзным основанием для безусловного подтверждения ранее излагавшихся теоретических предположений. Роль данных результатов в контексте выполнения проекта "Euler" заключается лишь в том, что их получение послужило поводом для начала работ в следующих предметных областях (именно в таком хронологическом порядке):

- Имитационные эксперименты по изучению процессов переноса в ограниченной плазме твёрдого тела, помещённой во внешнее статическое электромагнитное поле.
- Гармонический анализ свойств обобщённых функций, описывающих произвольную индикатрису кнудсеновского рассеяния диффузного газа квантовых частиц.
- Концептуальное обоснование полученных результатов, основанное на расширительном уточнении основных аксиоматических принципов статистической физики.

Автору также известны нетривиальные результаты некоторых экспериментов из других предметных областей физики, причём существование этих результатов может быть обусловлено теоретически предсказанными в настоящей работе явлениями. В качестве примера следует привести особый оптический эффект, обычно именуемый как "*смещение отражения к горизонту*". Суть эффекта заключается в том, что при направленном освещении твёрдой лакированной поверхности, обладающей некоторым микрорельефом, математическое ожидание всех реализуемых углов отражения рассеянного поверхностью пучка света — всегда больше угла падения этого пучка на данную

¹ Само по себе магнитное поле может быть и однородным, т. е. обязательного наличия градиента этого поля для проявления описываемых эффектов — не требуется.

поверхность. В случае же контакта поверхности с диффузным световым полем, проявление вышеуказанного эффекта заключается в монотонном увеличении видимой яркости этой поверхности по мере увеличения угла отражения. Причина такого "смещения от Ламберта к Эйлеру" пока не выяснена, однако при описании данного эффекта делаются предположения о его волновой (в частности, интерференционной) природе [21, стр. 43-45, 48]. Тем не менее, точные условия осуществления описанных оптических экспериментов не известны. Следовательно, выявленный эффект и здесь имеет косвенный характер, т. е. может рассматриваться лишь как «информация к размышлению».

Что же касается прямой экспериментальной проверки¹ полученных теоретических результатов, то такая проверка предполагает наличие двух этапов:

- Предварительная проверка решения задачи: "Физические эксперименты в области квантовой оптики". План этой предварительной проверки уже тщательно проработан (см. техническое задание на проведение фотометрических исследований в Приложении П2, стр. 161).
- Окончательная проверка решения задачи: "Эксперименты в области физики твёрдого тела" (см., например, возможную схему экспериментальной установки на рис. 3.22, стр. 95). Детали данной окончательной проверки пока не определены, поскольку они зависят от результатов предварительной проверки.



¹ Эффекты, выявленные в ходе проводимых в ФТИ работ, носили характер косвенных результатов и воспринимались только как «досадные помехи». Сейчас стало очевидно, что имевшиеся условия для возникновения этих «помех» — были очень далеки от оптимальных. При надлежащей организации физических экспериментов ожидаемый масштаб соответствующих макроэффектов должен возрасти на многие порядки.

Краткое обобщение содержания главы № 3

- Косинусный (кнудсеновский, ламбертовский) закон рассеяния частиц газа ограничивающей поверхностью, с которой данный газ находится в состоянии статистического равновесия, является прямым следствием второго закона термодинамики. Это было впервые строго доказано ещё в 1913 г. сначала Геде¹, а затем и другими² исследователями [17, стр. 27-29], [32, стр. 45]. Таким образом, если теперь предположить, что те особые физические системы, которые являлись предметом теоретического изучения в предыдущих главах настоящей работы, могут быть реализованы на практике в виде соответствующих технических устройств, то адекватное описание функционирования этих устройств — заведомо невыполнимо в рамках модельных представлений статистической физики и термодинамики.
- В упомянутых особых физических системах осуществимы процессы *полного* преобразования тепловой энергии в другие её виды (например, в электрическую энергию). Техническая реализация полученных решений в принципе позволяет создать теплоэнергетическое устройство со стопроцентным коэффициентом полезного действия. Причём функционирование такого устройства формально не нарушает, например, второго закона термодинамики (этот закон является своего рода «феноменологическим аналогом» *H*-теоремы Больцмана из статистической физики), поскольку, как уже говорилось, корректное описание данного устройства находится за пределами «зоны ответственности» соответствующих научных дисциплин³.
- Наиболее удобными для *экспериментального изучения* указанных процессов, видимо, являются оптические системы, в которых имеет место дифракция квантов диффузного электромагнитного излучения на неких отражающих поверхностях, ограничивающих объём изотропного светового поля (см. Приложение П2 на стр. 161).
- Самыми перспективными в плане *практического использования* на текущий момент считаются особые термомагнитные эффекты, существование которых предполагается в системах на основе ограниченных полупроводников.

В следующей главе приведены результаты имитационного моделирования термомагнитных эффектов, существование которых было бы наиболее интересно в практическом плане (см. "Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом", стр. 85).



¹ Gaede W. – Ann. d. Phys., 1913, В. 41, 331.

² Epstein P. S. – Phys. Rev., 1924, v. 23, 710; Clausing P. – Ann. d. Phys., 1930, В. 4, 533.

³ С этой точки зрения лишёна смысла какая-либо априорная убеждённость в непременном наличии неких фатальных ошибок, которые обязательно якобы имеются в любой конкретной технической реализации указанного теплоэнергетического устройства. Дело в том, что ключевой момент, определяющий принципиальную работоспособность такого устройства, состоит здесь в упомянутой возможности отклонения от косинусного закона при рассеянии частиц диффузного газа (см. рис. 2.21 на стр. 55), но не в том, насколько, например, велика работа, затрачиваемая на перемещение задвижек в сосуде на рис. 3.5 (стр. 73), или какие уравнения движения используются для описания динамики электронов проводимости в кристалле InSb на рис. 3.14 (стр. 91).

4. Имитационное моделирование исследуемых процессов

Подробное описание реализации имитационной модели исследуемых процессов, а также результаты численных экспериментов, полученные с помощью этой модели, входят в перечень тех разделов, которые не были включены в состав данной работы. Такая вынужденная мера объясняется тем, что указанный материал имеет весьма значительный объём, а его достаточно специализированное содержание представляет ограниченный интерес с точки зрения общего характера настоящего документа. Тем не менее, в этой главе всё же решено привести некоторую минимальную информацию, по возможности дающую представление о назначении созданной в рамках проекта имитационной модели, принципах её построения, и о содержании полученных результатов.

Назначение имитационной модели

Всякая имитационная модель предназначена для численного исследования некоторого объекта, корректное изучение которого весьма сложно (или невозможно в принципе) осуществить иными, например, сугубо аналитическими методами. Использование имитационного моделирования в настоящей работе обусловлено следующим:

- В отличие от натурального физического эксперимента, имитационная модель не подвержена влиянию каких-либо трудно учитываемых побочных воздействий на исследуемый объект. Например, если в математическое описание модели не будет *умышленно* привнесён такой технологический фактор, как неомический характер контактов на полупроводниковом образце, то указанный фактор заведомо не сможет исказить поведение изучаемой модели. Кроме того, реализуемый на компьютере имитационный эксперимент обходится, в большинстве случаев, гораздо дешевле соответствующего физического эксперимента на реальном объекте.
- При построении имитационных моделей, наряду с аналитическими методами математики, допустимо также использование любых необходимых численных методов. Это весьма расширяет перечень тех видов алгоритмов, реализация которых становится осуществимой в таких моделях. Применительно к рассматриваемым в данной работе проблемам появляется возможность моделирования исследуемых процессов принципиально более объективным образом: значения макроскопических характеристик равновесной замкнутой системы можно получать и без привлечения аксиоматических принципов статистической физики, т. е. путём безусловно корректной (требуемой по определению) процедуры временного (а не фазового) усреднения динамических параметров содержащихся в этой системе микрочастиц.
- Состав математического описания модели имитируемого объекта формируется по принципу минимальной достаточности (см. предыдущий пункт). Например, при создании имитационной модели электронной плазмы в ограниченном полупроводнике¹ никакие процессы переноса (различные виды дрейфа и т. п.) в эту модель не включаются: все указанные процессы должны возникать «естественным образом», как результат обобщения параметров движения электронов проводимости, для которых задаются лишь законы их динамики и вид процедуры релаксации импульсов.
- Большинство нетривиальных компонентов имитационной модели редко имеет точный аналитический вариант своего математического описания. Чаще всего бывает,

¹ См. подглаву "Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом", стр. 85.

что даже если некий аналитический вариант всё же и существует, то он, как правило, получен с применением достаточно произвольных приближений, последующее влияние которых на адекватность создаваемой модели невозможно объективно оценить. В такой ситуации метод имитационного моделирования позволяет легко использовать в качестве любой компоненты своего описания *эмпирическую* зависимость, отражающую имеющийся практический опыт в данной предметной области¹. Хотя столь «техническое» решение вопроса не выглядит так красиво, как типичный результат теоретических изысканий, однако оно гарантирует весьма хорошее согласие с реальностью, что, собственно, и является единственно важным для модели.

Общие принципы построения имитационной модели

В настоящем проекте осуществлялось имитационное моделирование наиболее вероятного макроскопического состояния системы, достаточно подробное описание которой было ранее дано в подглаве "Теплоэнергетические устройства с непрерывным циклом" (стр. 85). Немного напомним здесь принятую конфигурацию этой системы.

В ходе имитационных экспериментов моделируется динамика движения электронов проводимости в частично ограниченном образце антимонида индия (см. рис. 3.14 на стр. 91). Данный образец имеет вид полый трубы с открытыми торцами, внешняя и внутренняя поверхности которой взаимно коаксиальны и представляют собой прямые круговые цилиндры с радиусами, соответственно, r_{min} (внутренняя поверхность) и r_{max} (внешняя поверхность). В пространстве между внешней и внутренней поверхностями находится беспримесный монокристалл антимонида индия, имеющий температуру кипения жидкого азота (для нормального атмосферного давления: $T \approx 77.338^\circ K$).

Предполагается, что магнитное поле в исследуемой системе создается с помощью некоторого прямолинейного проводника с током, имеющего круглое сечение и размещенного внутри трубы с радиусом r_{min} на её оси симметрии "Z". Электрическое поле может быть создано с помощью равномерно распределенного избыточного заряда на том же осевом проводнике, с помощью которого создается магнитное поле.

Изучаемая физическая система содержит невырожденный газ квантовых частиц. Отсутствие вырождения даёт возможность использовать для моделирования процессов переноса так называемый *метод пробной частицы*, позволяющий рассматривать динамику движения каждой отдельной частицы в её индивидуальном фазовом μ -пространстве. Взаимодействие данной частицы со всеми остальными (случай неидеального газа) принимается во внимание как некоторый стохастический внешний фактор, зависящий от вида соответствующей самосогласованной одночастичной функции распределения².

¹ Примером указанной компоненты может служить упомянутая в предыдущем пункте процедура релаксации импульсов квантовых частиц, построенная на имитировании конкретного вероятностного результата каждого акта их дифракционного рассеяния.

² Есть некая аналогия между методом «пробной частицы» и понятием *орбитали*. Этот термин означает стационарное состояние, описываемое уравнением Шредингера для системы, состоящей только из одной частицы [23, стр. 117]. Однако метод пробной частицы предназначен для получения значений *макроскопических* параметров некоторого смешанного (например, равновесного) состояния системы, в то время как понятие орбитали применяют для обозначения единичного «чистого» микросостояния.

Динамика пробной частицы во время её свободного пробега (между актами релаксации импульса) определена как динамика классической бесспиновой частицы¹, обладающей зарядом электрона и массой, соответствующей омиической эффективной массе электрона проводимости InSb (для «азотной» температуры: $m_n^* \approx 0.013 \cdot m_0$).

Длина свободного пробега частицы² является стохастической величиной, распределённой по экспоненциальному закону, характеризуемому математическим ожиданием " ℓ " (для «азотной» дрейфовой подвижности электронов $\mu_n \approx 1\,200\,000 \text{ cm}^2 / (B \cdot \text{c})$ средняя длина их свободного пробега составляет примерно: $\ell \approx 5 \text{ mkm}$).

Внутриобъёмная релаксация импульсов электронов проводимости, соответствующая случаям рассеяния, например, на акустических фонах или на каких-либо нейтральных примесях кристаллической решётки, осуществляется либо строго упругим образом (модель Друде), либо имеет абсолютно неупругий характер (модель Лоренца). Следовательно, внутриобъёмные центры рассеяния играют здесь ту же стохастизирующую роль, что и «пылинки Планка» в релаксирующих оптических системах (см. подглаву "Значение изоэнергетических процессов для реальных систем", стр. 64).

В модели Друде пробная частица имеет постоянную сумму кинетической и потенциальной (при наличии радиального электрического поля) энергии. Величина этой энергии соответствует среднеквадратичному значению из максвелловского распределения, определенного для термодинамической температуры кристаллической решётки. Проявление внутриобъёмного рассеяния частиц заключается здесь в следующем: в результате любого единичного акта рассеяния частица полностью «забывает» информацию о предшествующей угловой направленности вектора своего импульса. Индикатриса рассеяния, характеризующая плотность вероятности движения частицы в каком-либо угловом направлении после акта внутриобъёмной релаксации, сферически симметрична в геометрическом пространстве (т. е. все направления – равновероятны).

Модель Лоренца отличается от модели Друде лишь тем, что акт внутриобъёмного рассеяния частицы приводит не только к утрате информации об угловой ориентации вектора её импульса, но также полностью «забывается» значение скалярной величины этого импульса, предшествующее процессу релаксации. После рассеяния абсолютная величина скорости электрона формируется случайным образом — опять-таки на основе максвелловского распределения, определенного для термодинамической температуры кристаллической решётки InSb. Из сказанного очевидно, что модель Лоренца предполагает предельно жёсткий алгоритм внутриобъёмной релаксации импульса движущейся частицы: вся информация о данном импульсе полностью и необратимо теряется в результате любого единичного акта рассеяния.

¹ Для принятой модели (сильно неоднородное электромагнитное поле) не существует точного аналитического решения системы уравнений движения частицы. Поэтому именно для данного случая был специально разработан особый численный метод, позволяющий весьма быстро и точно интегрировать указанные уравнения движения.

² Для антимонида индия само понятие «свободного пробега» (τ - приближение) электронов — не вполне корректно. Кристаллическая решётка InSb обычно определяется, как «ковалентная решётка со значительной долей ионности в связях». Такая «ионность» служит причиной «мягкого» кулоновского рассеяния частиц электронно-дырочной плазмы, непрерывно возмущающего динамику их «свободного» движения.

Характер рассеяния электронов на каждой из цилиндрических поверхностей, ограничивающих полупроводниковый образец, может быть выбран из трёх вариантов: зеркальное отражение, диффузное рассеяние и дифракция¹. Взаимодействие частиц с какой-либо поверхностью во всех случаях считается упругим, т. е. скалярные величины импульсов рассеиваемых поверхностью частиц — сохраняются.

Определение процесса *зеркального* отражения тривиально: имеется в виду одноканальное когерентное отражение, проявляющееся лишь в инвертировании знака той составляющей импульса частицы, которая нормальна к отражающей поверхности.

Процесс *диффузного* рассеяния можно определить как «жёсткий» вариант закона Кнудсена: после рассеяния частицы на стенке плотность вероятности угловой ориентации её импульса определяется формулой (2.2), стр. 34. Всякая информация о направлении движения данной частицы до её столкновения со стенкой — полностью теряется.

Индикатриса *дифракционного* рассеяния частиц на стенке описана в настоящей модели эмпирической зависимостью, представляющую соответствующую индикатрису рассеяния как сумму абсолютно зеркальной и абсолютно диффузной составляющих. Количественные пропорции между данными составляющими сложным нелинейным образом зависят от угла падения квантовой частицы на поверхность, от длины волны де Бройля этой частицы, и от геометрических параметров микрорельефа рассеивающей поверхности. Казалось бы, что итоговая индикатриса рассеяния, математическое представление которой даже не отвечает условиям Дирихле (очевидно наличие разрывов второго рода между ограниченной по вариации диффузной составляющей индикатрисы и её зеркальной компонентой, описываемой через импульсную δ -функцию Дирака), является слишком примитивной по своему виду. Однако, что совершенно поразительно, именно такая (с точностью до постоянного множителя) индикатриса дифракционного рассеяния различного рода волн на неровной поверхности с хаотическим микрорельефом была независимо получена в разное время различными исследователями в столь отличающихся друг от друга предметных областях, как квантовая оптика [21, стр. 63 и 65], акустика [22, стр. 240], твёрдотельная электроника [48, стр. 236] и т. д.

На первый взгляд можно бы надеяться, что выбранная процедура дифракционного рассеяния частиц поверхностью, столь хорошо соответствующая практике, и никак не связанная с излагаемыми в настоящей работе теоретическими построениями, должна существенно повысить объективность получаемых результатов имитационного моделирования. Тем не менее, следует учесть, что у индикатрисы, заданной как комбинация диффузной и зеркальной компонент, имеется ряд особых свойств, описанных ниже.

$$\text{Пусть индикатриса равна: } g(\beta|\alpha) = \xi(\alpha, \lambda, R_z) \cdot \delta(\alpha - \beta) + (1 - \xi(\alpha, \lambda, R_z)) \cdot f(\beta) \quad (4.1)$$

где $g(\beta|\alpha)$ — плотность вероятности рассеяния под углом " β " частицы, имеющей угол падения " α "; $\delta(\alpha - \beta)$ — импульсная дельта-функция Дирака, описывающая зеркальную компоненту отражения; $f(\beta)$ — плотность вероятности диффузного рассеяния частицы; $\xi(\alpha, \lambda, R_z) \in [0, 1]$ — вероятность того, что частица, имеющая угол падения " α " и длину волны " λ ", зеркально отразится от поверхности с высотой микрорельефа R_z .

¹ В рассматриваемой модели принято, что релаксация импульсов частиц на указанных поверхностях — никак не связана с такой характеристикой, как длина свободного пробега частиц, которая лимитируется исключительно внутриобъёмным рассеянием.

Нетрудно убедиться, что кнудсеновский закон рассеяния частиц диффузного газа поверхностью, равно как и закон детального равновесия, может иметь место только для весьма странного варианта функции: $\xi(\alpha, \lambda, R_z) = Const \in [0,1]$. Такой вывод справедлив как для двумерных, так и для трёхмерных систем. Заранее нельзя сказать, является ли отклонение от закона Кнудсена при $\xi(\alpha, \lambda, R_z) \neq Const$ признаком ограниченной достоверности данной модели рассеяния для $\forall \alpha \in [0, \pi/2)$, или же это отклонение носит объективный характер и отражает вполне реальные физические свойства [21, стр. 63].

Результаты имитационных экспериментов

Во время осуществления проекта “Euler” было проведено около двухсот имитационных экспериментов, в ходе которых ставились следующие цели:

- Проверка корректности математического описания моделируемого объекта.
- Тестирование правильности программной реализации имитационной модели.
- Проверка обоснованности ранее полученных теоретических выводов.

В настоящей работе представлены результаты только восьми экспериментов, но их вполне достаточно для примера того, в какой степени указанные цели были достигнуты. На рис. 4.1 показан типичный листинг псевдографики, отображающий результат выполнения отдельного имитационного эксперимента для определённых условий.



Содержание основных полей в листинге результата:

1. Поле, содержащее информацию о характере внутриобъёмной релаксации импульса пробной частицы (электрона проводимости InSb), а также о радиальных размерах полупроводникового образца и о виде рассеяния частицы поверхностью с тем или иным радиусом (для случая дифракционного рассеяния — приводятся данные о геометрических параметрах микрорельефа поверхности).
2. Информация о количестве актов внутриобъёмной релаксации импульса электрона, а также о числе случаев взаимодействия этой частицы с каждой из поверхностей.
3. Поле, содержащее информацию о параметрах статического электромагнитного поля, создаваемого осевым проводником (см. рис. 3.14 на стр. 91): приведено значение магнитной индукции "B" (если по проводнику течёт ток) и величина напряжённости электрического поля "E" (если проводник имеет избыточный заряд). Значение "B" соответствует величине магнитной индукции (в Тёслах) на расстоянии r_{min} от оси токонесящего проводника (т. е. от оси "Z"). Значение "E" соответствует величине напряжённости электрического поля (В/м) на расстоянии r_{min} от оси "Z" бесконечно заряженного проводника. Каждый из параметров "B" или "E" может иметь тот или иной знак или может быть равен нулю.
4. Поле, содержащее информацию о средней длине свободного пробега пробной частицы и о порядке сходимости численного метода решения уравнений её движения¹ (приводится для случаев отсутствия аналитического решения), а также указание метода генерирования псевдослучайных последовательностей в программе. В настоящей модели можно выбрать как "естественный" метод² инициализации значений стохастических данных ("Natural"), так и специальный «малодисперсионный» метод ("LPт"), эффективно применимый для эргодических систем [39, 40, 41].
5. Поле, содержащее информацию о математических ожиданиях и дисперсиях как углов падения пробной частицы на каждую из цилиндрических поверхностей образца, так и углов отражения от этих поверхностей³. В каждом случае эти данные приводятся отдельно для двух азимутальных направлений, находящихся во взаимно перпендикулярных плоскостях: в плоскости "R-O-Z", в которой лежит ось симметрии образца, и в плоскости "R-O-T", перпендикулярной указанной оси симметрии.

¹ При расчете траектории движения электрона в неоднородном статическом электромагнитном поле возникает необходимость вычисления некоторых интегралов от аналитически неинтегрируемых функций. Порядок сходимости численного метода здесь определяется порядком полиномов, используемых специальной процедурой высокоточной аппроксимации этих функций другими функциями, иррациональными, но аналитически интегрируемыми (в рекуррентном пределе). Величина порядка сходимости метода задается чётным числом из диапазона от 2 до 8.

² Два датчика псевдослучайных чисел, в которых реализована смешанная аддитивно-мультипликативная разновидность линейного конгруэнтного метода, соединены между собой по схеме Маклорена-Марсальи [24, стр. 47]. Индетерминированная инициализация датчиков осуществляется на основании информации таймера компьютера.

³ Поскольку речь идёт о фиксированных азимутальных направлениях, принадлежащих некоторым выделенным плоскостям, то здесь имеется в виду случай двумерной (2D) индикатрисы, предполагающий ОДЗ углов падения и отражения: $\alpha, \beta \in (-\pi/2, \pi/2)$.

Например, для случая кнудсеновского рассеяния диффузного газа математические ожидания углов падения и отражения должны быть близки к нулю ($\mathbf{M}\alpha \approx \mathbf{M}\beta \approx 0$), а их дисперсии — примерно равны величине: $\mathbf{D}\alpha \approx \mathbf{D}\beta \approx \pi^2/4 - 2 \approx 0.4674$.

6. Информация о средней величине¹ осевой (т. е. направленной вдоль оси симметрии образца) скорости дрейфа пробной частицы. Для оценки статистической значимости указанной величины приводится вероятность того, что за время наблюдения (продолжительность проведения эксперимента) обнаружится флуктуация тока (эффект Найквиста), порождающая перенос заряда с такой же или большей скоростью.
7. Поле, содержащее гистограмму тех значений осевой скорости пробной частицы, которые она имеет во время пребывания в частях объёма системы, характеризующих указанными величинами радиальной координаты (в отличие от пункта 6, где имеется в виду скорость переноса, усреднённая по всему допустимому диапазону изменения радиальной координаты, т. е. средняя для всей площади боковых торцов образца).
8. Поле, содержащее гистограмму относительных отклонений концентрации частиц в различных частях объёма системы (как и в пункте 7) от своего среднего значения. Этот средний уровень концентрации, который соответствует случаю диффузного газа, выделен цветом. Данные масштабируются таким образом, чтобы вариации значений концентрации могли заполнить всю выделенную для гистограммы площадь на листинге результата (для увеличения разрешающей способности изображения).
9. Поле, содержащее информацию об отношении значений того удельного (на единицу площади) статического давления, которое газ пробных частиц независимо оказывает на внешнюю (r_{max}) и внутреннюю (r_{min}) цилиндрические поверхности.
10. Поле, содержащее информацию об усреднённых значениях «продольных» (т. е. направленных вдоль оси "Z") импульсов, которыми пробная частица обменивается с различными элементами кристаллической решётки образца InSb. Представлены данные о балансе импульсов между частицей и каждой из цилиндрических поверхностей (внешней и внутренней). Приведена также информация о тех импульсах частицы, которые она в среднем имеет всякий раз до очередного акта внутриобъёмного рассеяния и после такового. Имеется итоговая информация, суммирующая данные по «продольным» (вдоль оси "Z") импульсам, так или иначе передаваемым частицей различным элементам кристаллической решётки.

Далее приведены листинги результатов следующих имитационных экспериментов:

- Эксперимент "SCL-00(NE)" — см. рис. 4.2 на стр. 109.
- Эксперимент "SCL-01(N6)" — см. рис. 4.3 на стр. 110.
- Эксперимент "SCL-E1(N8)" — см. рис. 4.4 на стр. 111.
- Эксперимент "QRL-00(NE)" — см. рис. 4.5 на стр. 112.
- Эксперимент "QRL-10(N8)" — см. рис. 4.6 на стр. 113.
- Эксперимент "QCD-01(N6)" — см. рис. 4.7 на стр. 114.
- Эксперимент "QCD-X0(NE)" — см. рис. 4.8 на стр. 115.
- Эксперимент "QCD-X1(N6)" — см. рис. 4.9 на стр. 116.

Изложение краткого комментария ко всем этим результатам — начинается на стр. 117.

¹ Здесь и далее имеется в виду усреднение *по времени*, но не *фазовое* усреднение.



Результат имитационного эксперимента "SCL-00(NE)"

(моделируется поведение эргодической системы, изображённой на рис. 3.16, стр. 92)

Отражение частицы: для поверхности r_{max} – зеркальное, для r_{min} – зеркальное.

Внешние поля: магнитное – отсутствует, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": отсутствуют.

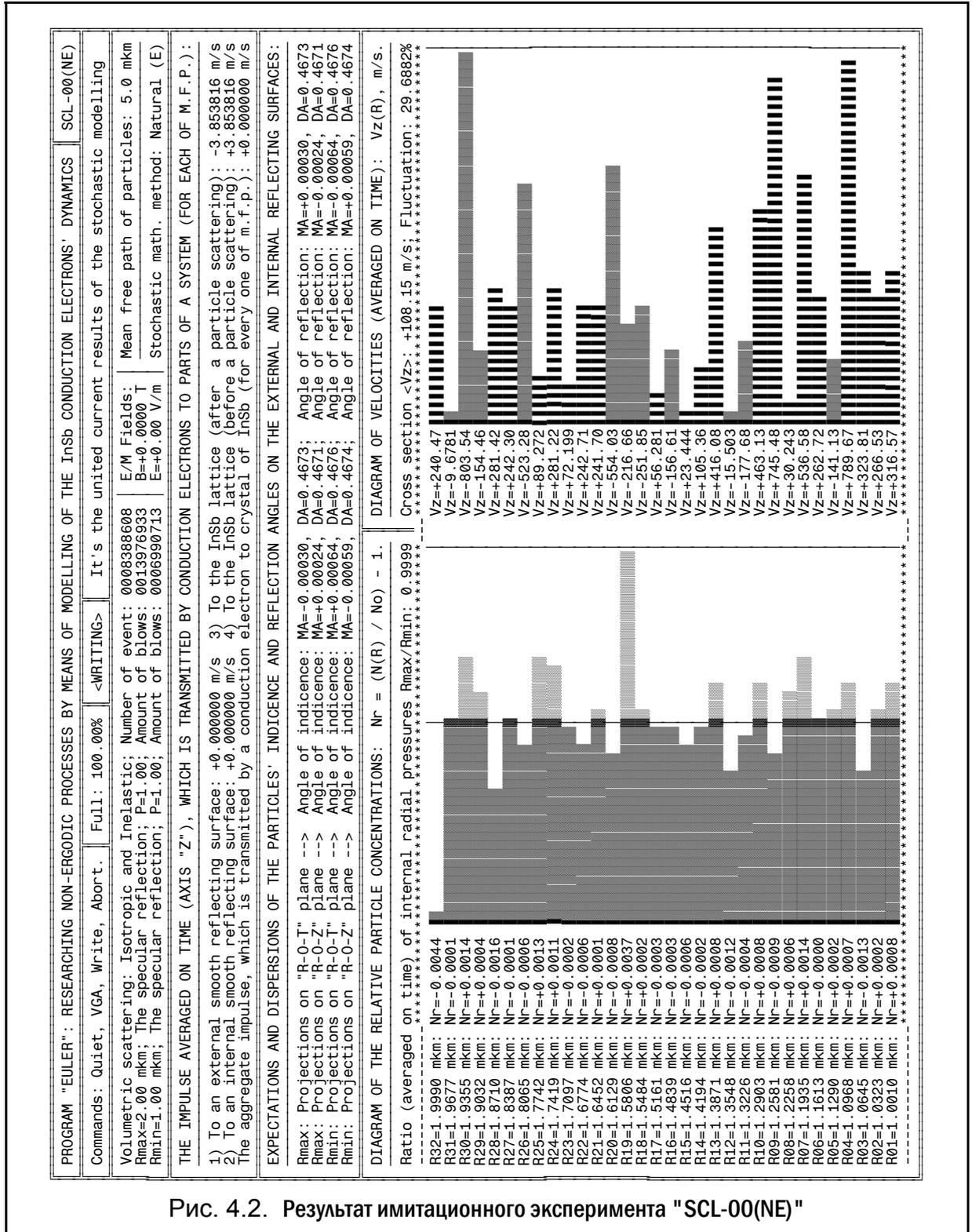


Рис. 4.2. Результат имитационного эксперимента "SCL-00(NE)"





Результат имитационного эксперимента "SCL-01(N6)"

(моделируется поведение эргодической системы, изображённой на рис. 3.17, стр. 93)

Отражение частицы: для поверхности r_{max} – зеркальное, для r_{min} – зеркальное.

Внешние поля: магнитное – имеется, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": отсутствуют.

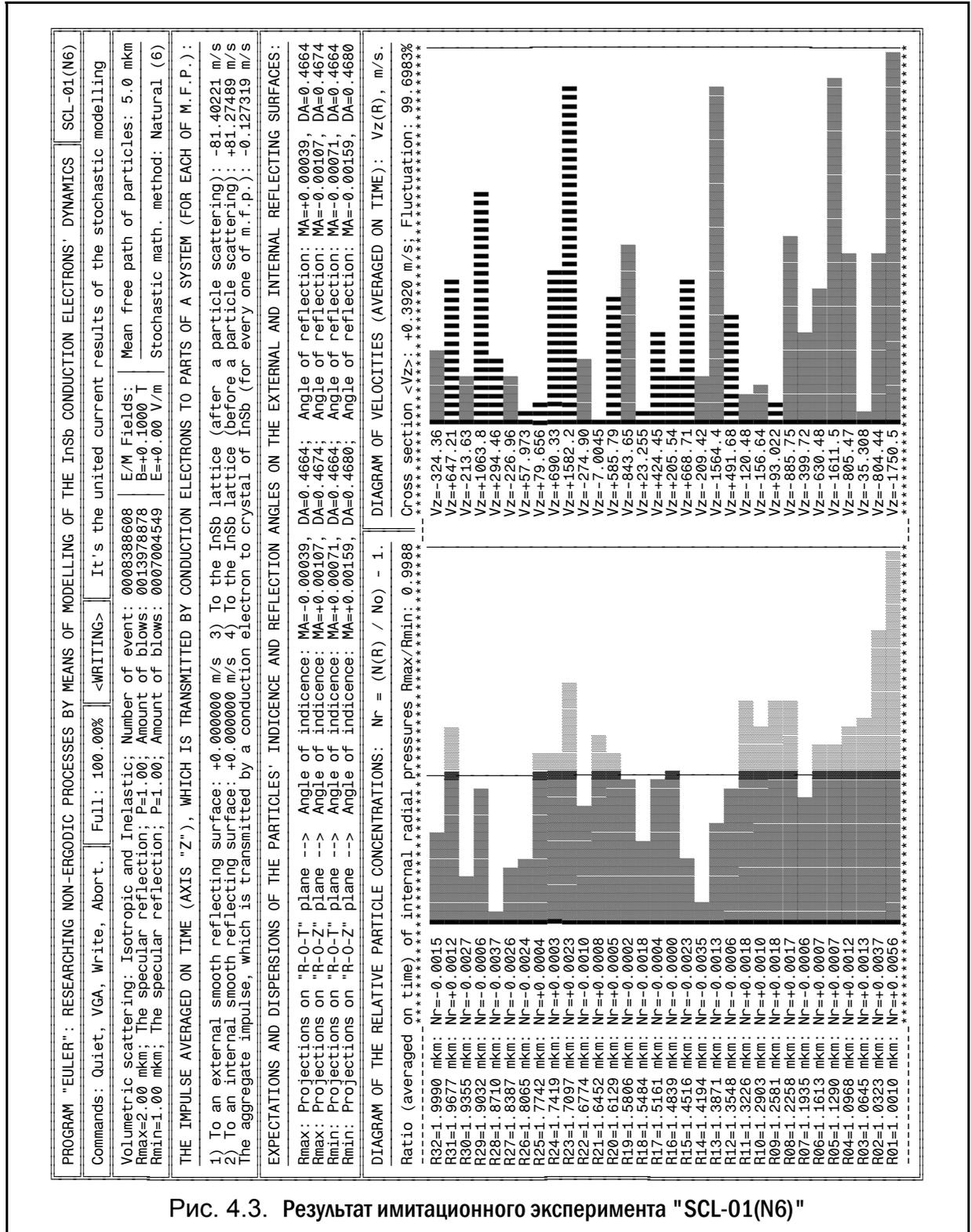


Рис. 4.3. Результат имитационного эксперимента "SCL-01(N6)"





Результат имитационного эксперимента "SCL-E1(N8)"

(моделируется поведение эргодической системы, изображённой на рис. 3.18, стр. 93)

Отражение частицы: для поверхности r_{max} – зеркальное, для r_{min} – зеркальное.

Внешние поля: магнитное – имеется, электрическое – имеется.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": отсутствуют.

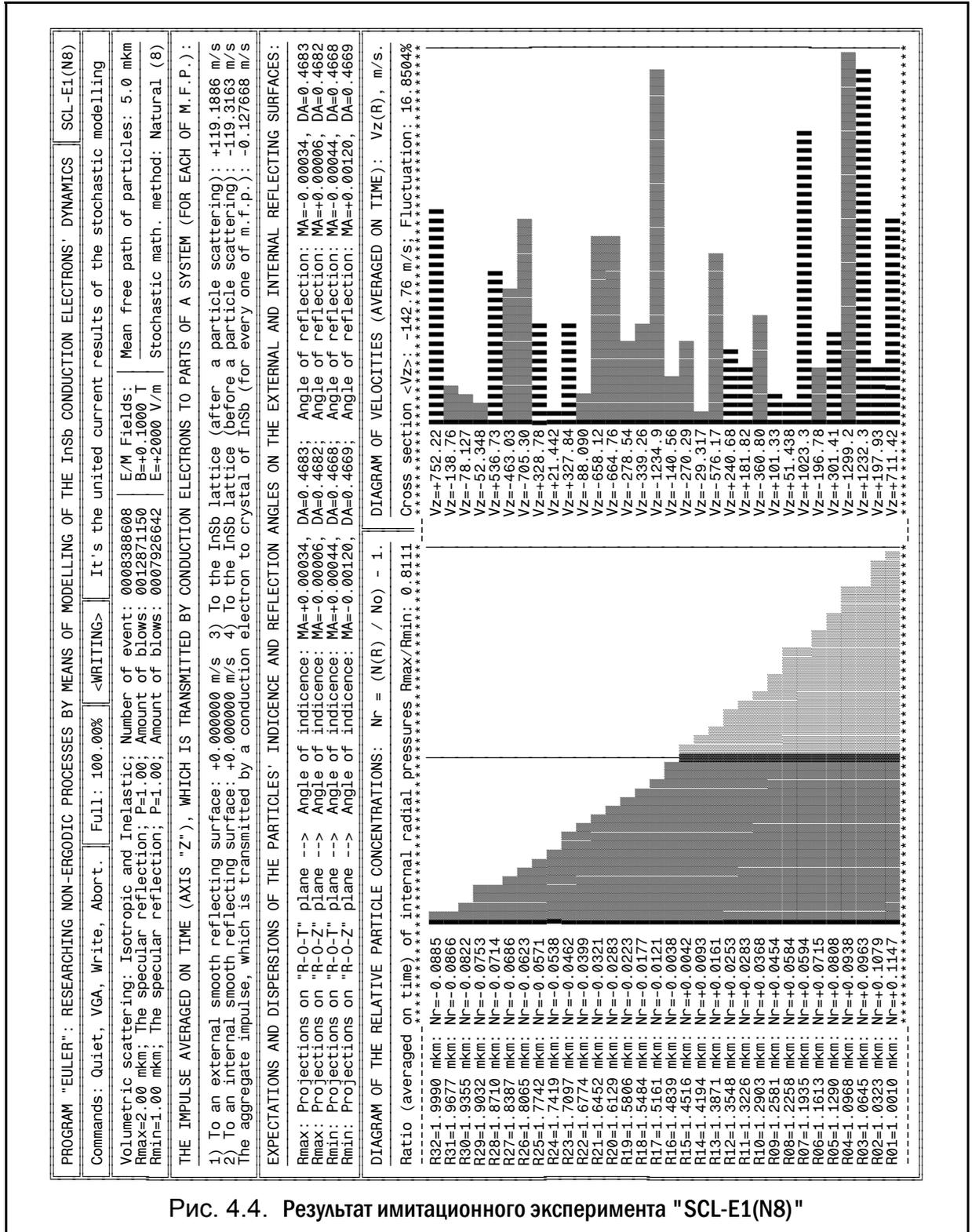


Рис. 4.4. Результат имитационного эксперимента "SCL-E1(N8)"





Результат имитационного эксперимента "QRL-00(NE)"

(моделируется поведение неэргодической системы, изображённой на рис. 3.19, стр. 94)

Отражение частицы: для поверхности $r_{max} \sim$ зеркальное, для r_{min} – дифракция.

Внешние поля: магнитное – отсутствует, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": отсутствуют.

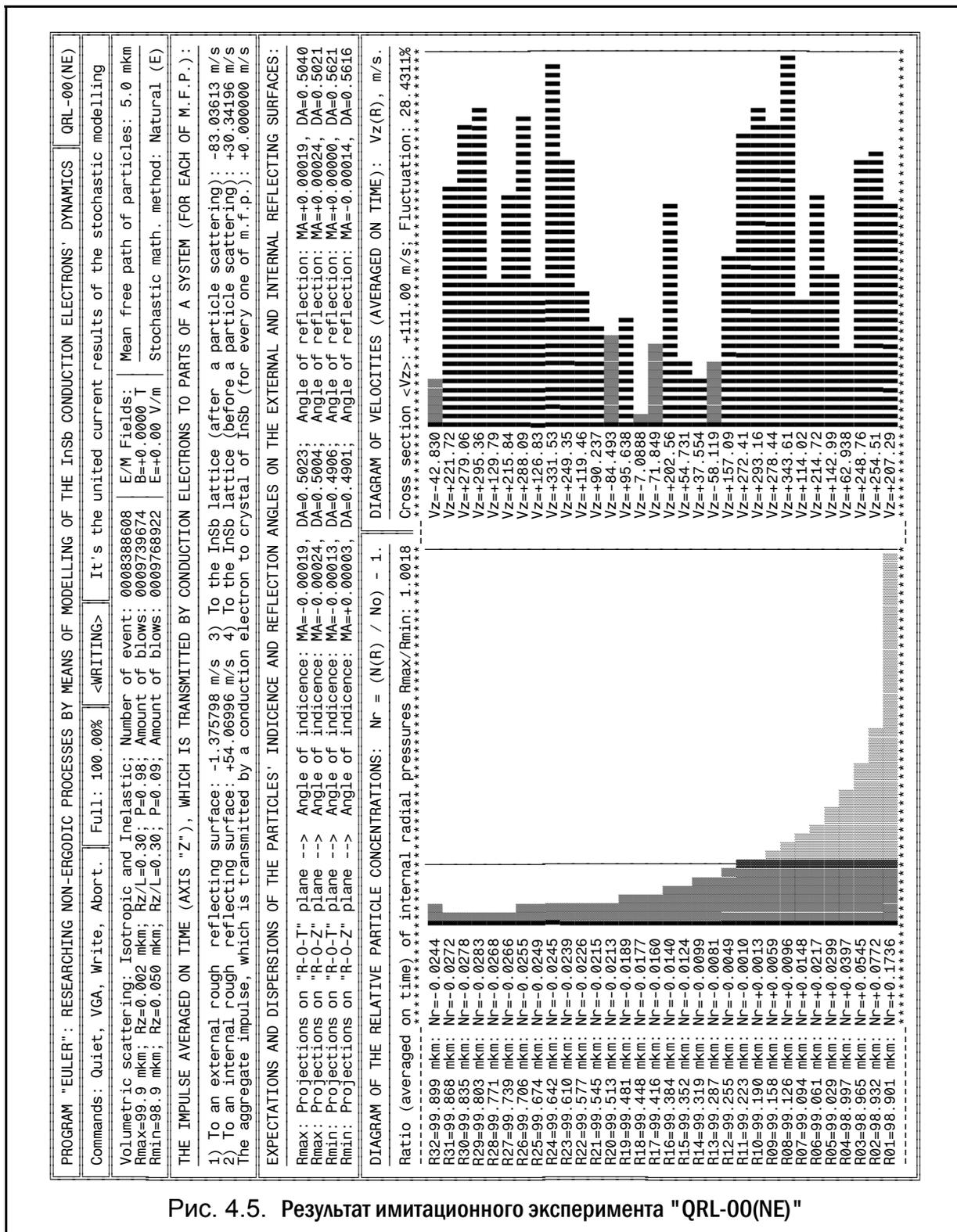


Рис. 4.5. Результат имитационного эксперимента "QRL-00(NE)"





Результат имитационного эксперимента "QRL-10(N8)"

(моделируется поведение неэргодической системы, изображённой на рис. 3.20, стр. 94)

Отражение частицы: для поверхности r_{max} ~ зеркальное, для r_{min} – дифракция.

Внешние поля: магнитное – имеется, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": имеются.

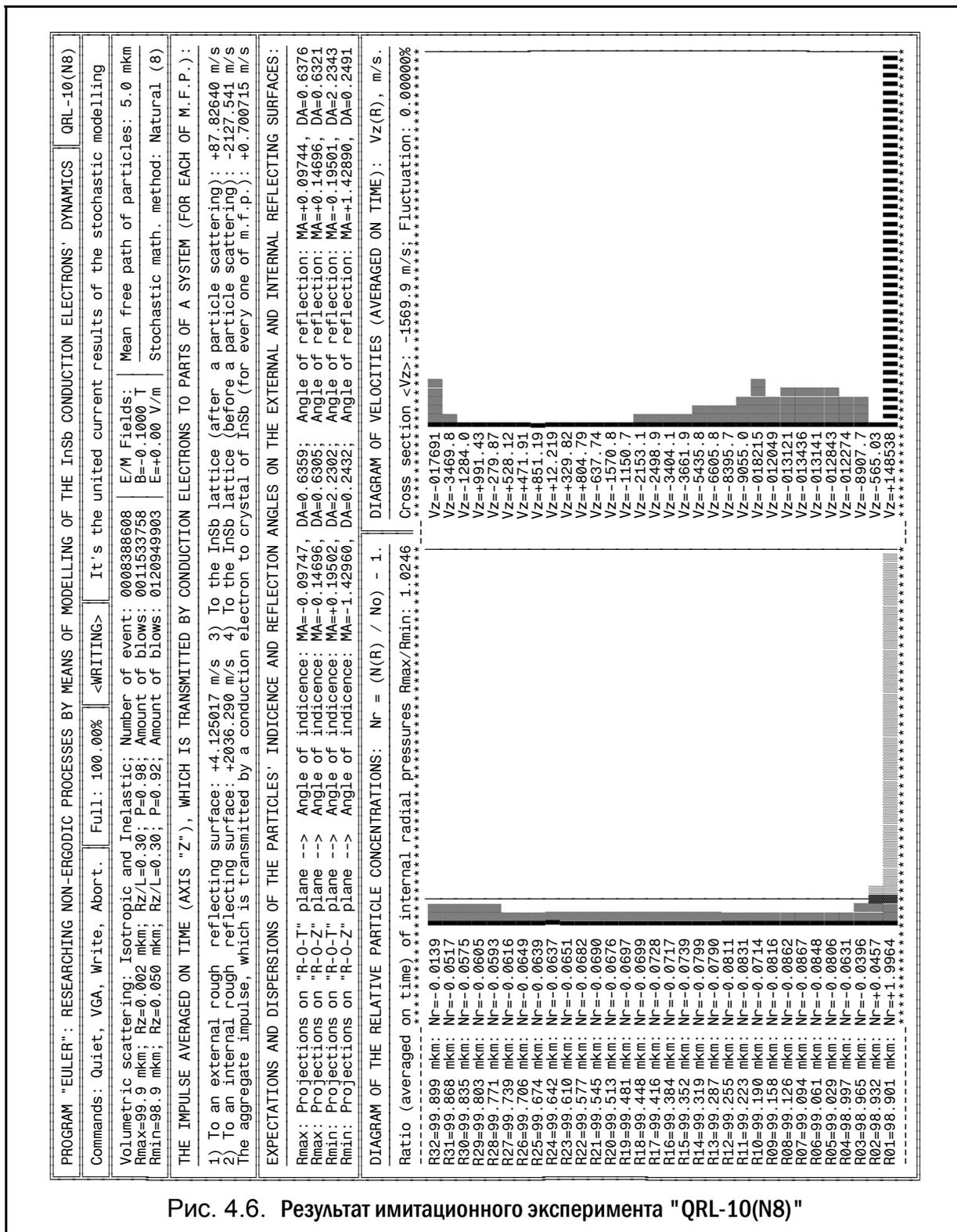


Рис. 4.6. Результат имитационного эксперимента "QRL-10(N8)"





Результат имитационного эксперимента "QCD-01(N6)"

(моделируется поведение неэргодической системы, изображённой на рис. 3.20, стр. 94)

Отражение частицы: для поверхности $r_{max} \sim$ зеркальное, для r_{min} – дифракция.

Внешние поля: магнитное – имеется, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": имеются.

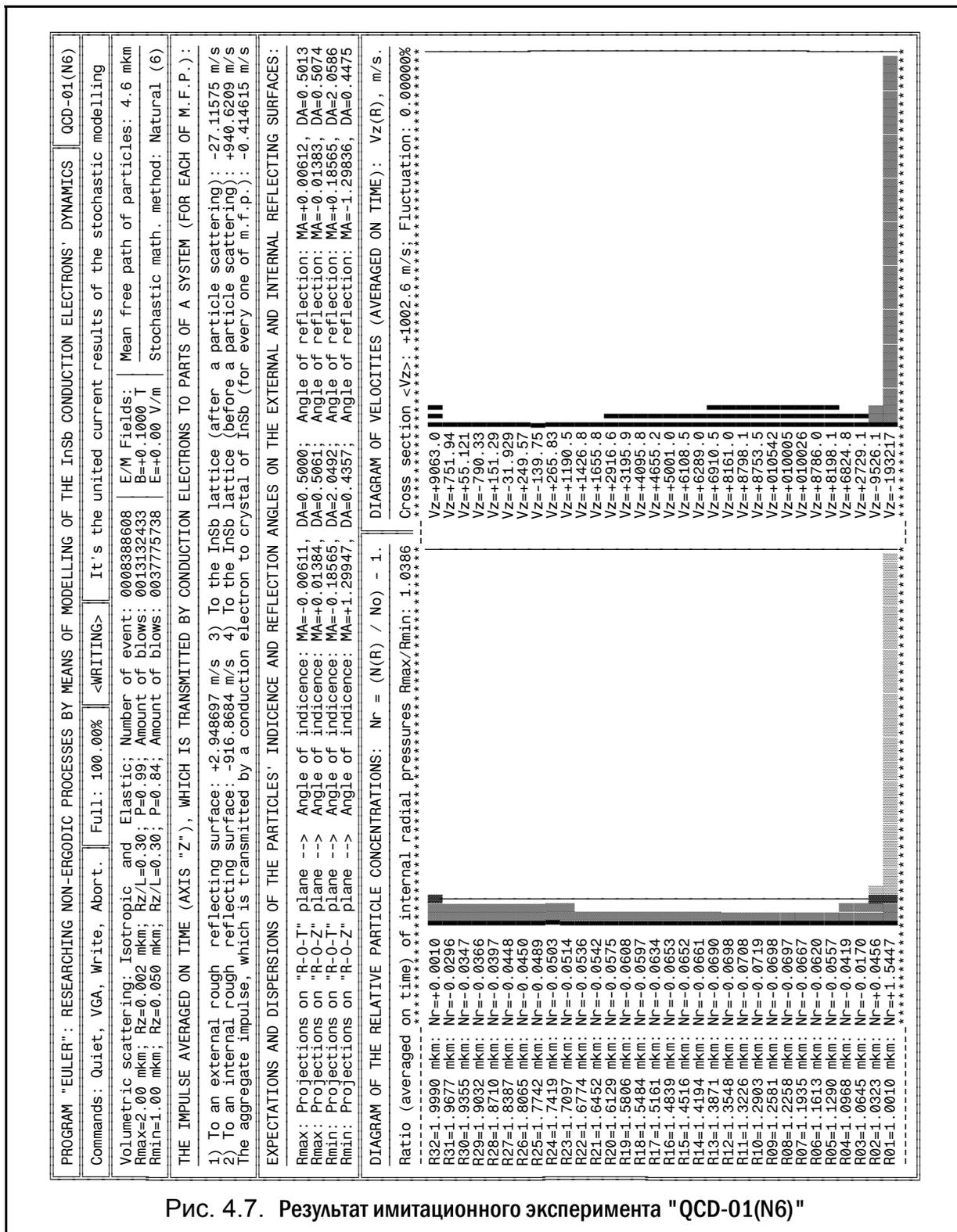


Рис. 4.7. Результат имитационного эксперимента "QCD-01(N6)"





Результат имитационного эксперимента "QCD-X0(NE)"

(моделируется поведение неэргодической системы, изображённой на рис. 3.19, стр. 94)

Отражение частицы: для поверхности $r_{max} \sim$ зеркальное, для r_{min} – дифракция.

Внешние поля: магнитное – отсутствует, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": отсутствуют.

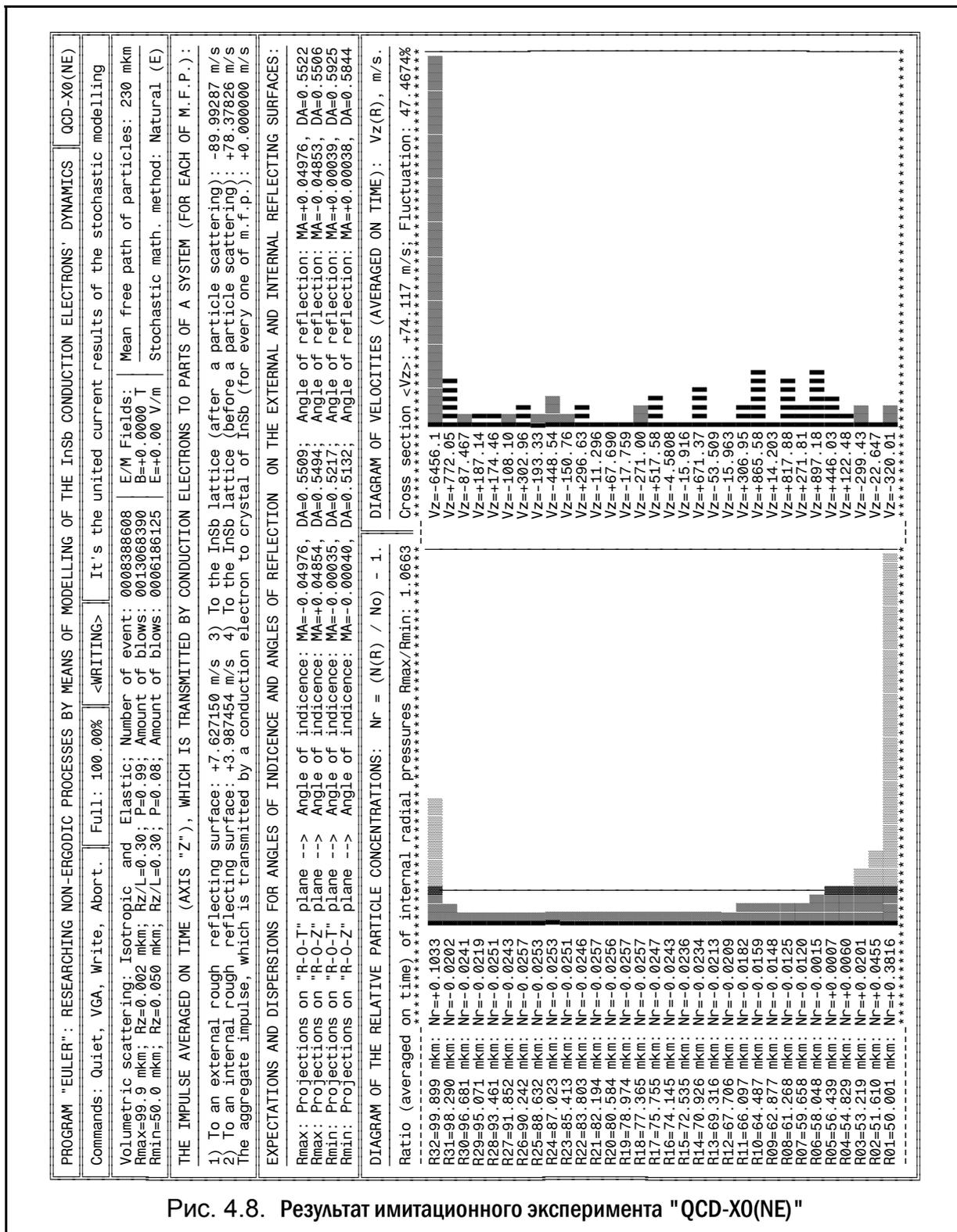


Рис. 4.8. Результат имитационного эксперимента "QCD-X0(NE)"





Результат имитационного эксперимента "QCD-X1(N6)"

(моделируется поведение неэргодической системы, изображённой на рис. 3.20, стр. 94)

Отражение частицы: для поверхности r_{max} ~ зеркальное, для r_{min} – дифракция.

Внешние поля: магнитное – имеется, электрическое – отсутствует.

Явления переноса в системе, направленные вдоль оси "Z": имеются.

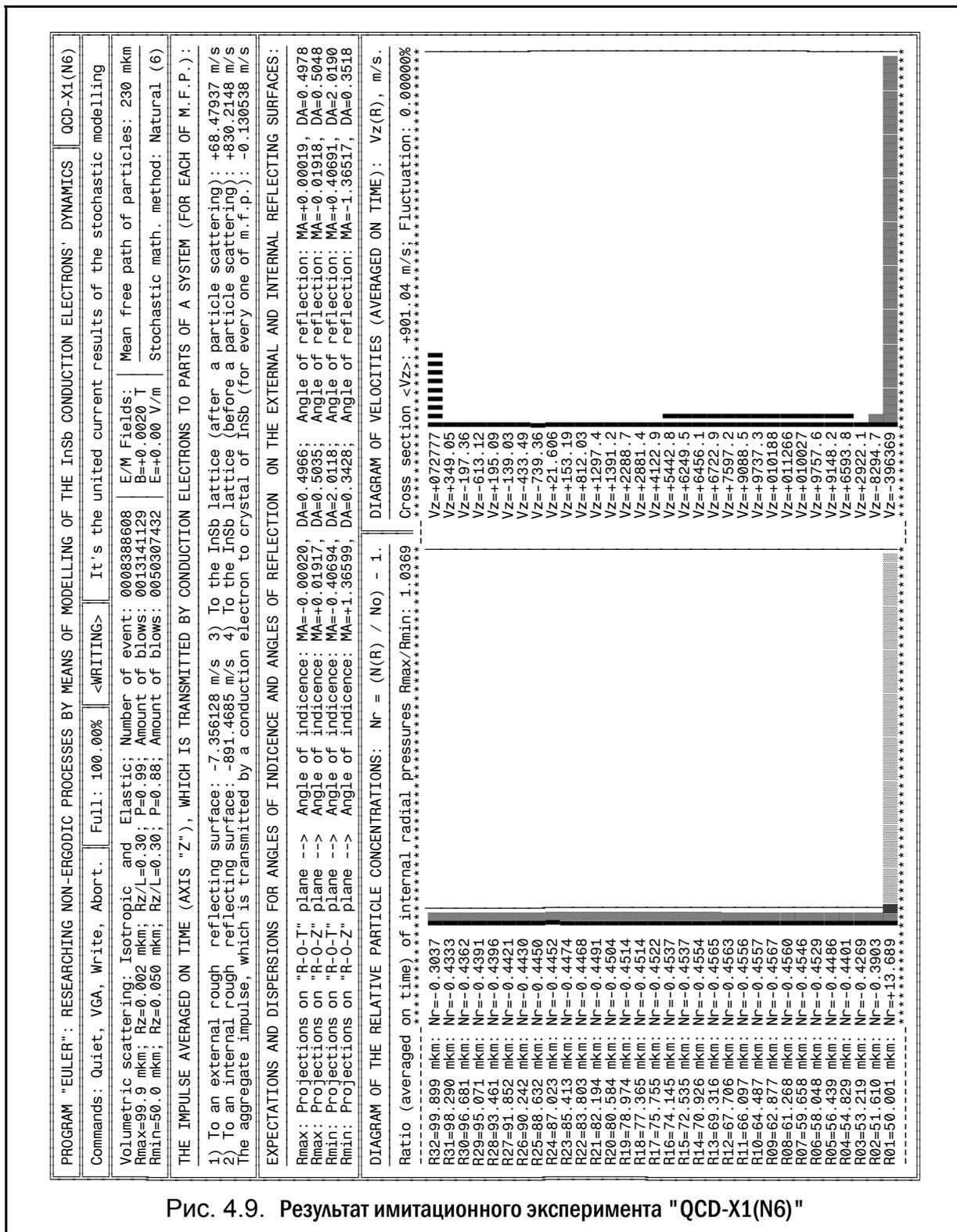


Рис. 4.9. Результат имитационного эксперимента "QCD-X1(N6)"



Комментарий к результатам имитационных экспериментов**Эксперимент "SCL-00(NE)" (рис. 4.2 на стр. 109)**

- **Цель эксперимента:** Проверка корректности математического описания моделируемого объекта. Тестирование правильности программной реализации имитационной модели.
- **Свойства системы:** Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам эргодической системы, изображённой на рис. 3.16, стр. 92. Отражение частицы от внешней поверхности – зеркальное, от внутренней поверхности – зеркальное. Внутриобъёмное рассеяние – по Лоренцу. Магнитное поле – отсутствует, электрическое поле – отсутствует.
- **Результаты:** Все параметры системы соответствуют случаю равновесного состояния (в классическом определении этого термина). Интенсивность процессов переноса и неоднородность объёмной концентрации частиц – на уровне флуктуаций.
- **Примечания:** Ввиду наличия актов внутриобъёмного рассеяния, в системе не сохраняется никакое метастабильное состояние (определяемое, например, начальными параметрами движения пробной частицы), отличное от состояния диффузного газа.

Эксперимент "SCL-01(N6)" (рис. 4.3 на стр. 110)

- **Цель эксперимента:** Проверка корректности математического описания моделируемого объекта. Тестирование правильности программной реализации имитационной модели.
- **Свойства системы:** Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам эргодической системы, изображённой на рис. 3.17, стр. 93. Отражение частицы от внешней поверхности – зеркальное, от внутренней поверхности – зеркальное. Внутриобъёмное рассеяние – по Лоренцу. Магнитное поле – имеется, электрическое поле – отсутствует.
- **Результаты:** Все параметры системы соответствуют случаю равновесного состояния (в классическом определении этого термина). Интенсивность процессов переноса и неоднородность объёмной концентрации частиц – на уровне флуктуаций. В частности, отсутствуют статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца.
- **Примечания:** Не смотря на то, что магнитное поле сильно неоднородно ($r_{max}/r_{min} = 2$), в системе строго соблюдается нулевой баланс всех видов дрейфа (скин-дрейф, градиентный и центробежный дрейфы). Это свидетельствует о высокой точности расчёта параметров движения пробной частицы.

Эксперимент "SCL-E1(N8)" (рис. 4.4 на стр. 111)

- **Цель эксперимента:** Проверка корректности математического описания моделируемого объекта. Тестирование правильности программной реализации имитационной модели.
- **Свойства системы:** Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам эргодической системы, изображённой на рис. 3.18, стр. 93. Отражение частицы от внешней поверхности – зеркальное, от внутренней поверхности – зеркальное. Внутриобъёмное рассеяние – по Лоренцу. Магнитное поле – имеется, электрическое поле – имеется.
- **Результаты:** Все параметры системы соответствуют случаю равновесного состояния (в классическом определении этого термина), реализуемого при наличии потенциального поля: гистограмма объёмной концентрации частиц имеет вид, схожий с барометрической кривой. Интенсивность процессов переноса – на уровне флуктуаций. В частности, отсутствуют статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца.
- **Примечания:** По сравнению с предыдущим случаем, в систему «добавлены» ещё два вида дрейфа: диамагнитный и электрический. Тем не менее, по-прежнему точно соблюдается нулевой баланс всех видов дрейфа, что опять-таки свидетельствует о высоком качестве расчёта параметров движения частицы.

Эксперимент "QRL-00(NE)" (рис. 4.5 на стр. 112)

- **Цель эксперимента:** Проверка обоснованности теоретических выводов, полученных в данной работе.
- **Свойства системы:** Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам неэргодической системы, приведённой на рис. 3.19, стр. 94. Отражение частицы от внешней поверхности – практически зеркальное, на внутренней поверхности – дифракция. Внутриобъёмное рассеяние – по Лоренцу. Магнитное поле – отсутствует, электрическое поле – отсутствует. Относительная кривизна формирующих поверхностей образца незначительна, так как $r_{max}/r_{min} \approx 1$, т. е. геометрия пространства, в котором движется частица, имеет довольно плоскую форму (как в установке на рис. 3.22, стр. 95).
- **Результаты:** Объёмная концентрация частиц – пространственно неоднородна. Зависимость концентрации от значения радиальной координаты имеет такой же качественный вид, который был ранее предсказан теоретически. Статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца – отсутствуют.

- **Примечания:** Несмотря на различие в величине объёмной концентрации частиц вблизи внешней и внутренней поверхностей образца, отношение удельного давления газа на указанные поверхности по-прежнему близко к единице (с точностью до флуктуаций). Это объясняется тем, что в данных условиях характеристика давления является тензорной величиной и зависит не только от концентрации частиц газа, но и от углового направления в геометрическом пространстве (см. рис. 3.4 на стр. 72). Такое равенство давлений является прямым следствием соблюдения закона сохранения импульса¹ (см., например, распределение газа в системе на рис. 3.7, стр. 74).

Эксперимент "QRL-10(N8)" (рис. 4.6 на стр. 113)

- **Цель эксперимента:** Проверка обоснованности теоретических выводов, полученных в данной работе.
- **Свойства системы:** Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам неэргодической системы, приведённой на рис. 3.20, стр. 94. Отражение частицы от внешней поверхности – практически зеркальное, от внутренней поверхности – дифракция. Внутриобъёмное рассеяние – по Лоренцу. Магнитное поле – имеется, электрическое поле – отсутствует. Относительная кривизна формирующих поверхностей образца незначительна, так как $r_{max}/r_{min} \approx 1$, т. е. геометрия пространства, в котором движется частица, имеет довольно плоскую форму (как в установке на рис. 3.22, стр. 95).
- **Результаты:** Объёмная концентрация частиц – пространственно неоднородна. В системе имеются статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца. Данные явления имеют такой же качественный вид, который был ранее предсказан теоретически.
- **Примечания:** Интересно, что и при наличии несбалансированного потока вдоль оси "Z" общая сумма импульсов, передаваемых пробной частицей различным элементам кристаллической решётки InSb, равна нулю (с точностью до флуктуаций). В частности, никакой «отдачи» не испытывает источник внешнего магнитного поля. Распределение импульсов в системе выглядит так, как будто электроны проводимости «продираются» сквозь центры внутриобъёмного рассеяния решётки, «отталкиваясь» при этом (в процессе дифракционного рассеяния) от тех стенок образца, которые имеют микро-рельеф (см. соответствующие поля листинга результата).

¹ Закон сохранения импульса требует абсолютно точного соблюдения указанного равенства удельных давлений только в случае *плоской* макроскопической формы тех взаимно параллельных поверхностей, которые ограничивают объём квантового газа.

Эксперимент "QCD-01(N6)" (рис. 4.7 на стр. 114)

- Цель эксперимента: Проверка обоснованности теоретических выводов, полученных в данной работе.
- Свойства системы: Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам неэргодической системы, приведённой на рис. 3.20, стр. 94. Отражение частицы от внешней поверхности – практически зеркальное, от внутренней поверхности – дифракция. Внутриобъёмное рассеяние – по Друде. Магнитное поле – имеется, электрическое поле – отсутствует. Относительная кривизна формообразующих поверхностей образца весьма значительна, так как $r_{max}/r_{min} = 2$.
- Результаты: Объёмная концентрация частиц – пространственно неоднородна. В системе имеются статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца. Данные явления имеют такой же качественный вид, который был ранее предсказан теоретически.
- Примечания: Выполнен вариант предыдущего имитационного эксперимента, реализованный для упругого внутриобъёмного рассеяния частиц (модель Друде) и сильно неоднородного магнитного поля. Данные изменения в параметрах модели не повлияли на качественный характер итоговых результатов.

Эксперимент "QCD-X0(NE)" (рис. 4.8 на стр. 115)

- Цель эксперимента: Проверка обоснованности теоретических выводов, полученных в данной работе. Проверяется также обоснованность применения *смешанного* описания динамики пробной частицы, использованного в настоящей модели.
- Свойства системы: Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам неэргодической системы, приведённой на рис. 3.19, стр. 94. Отражение частицы от внешней поверхности – практически зеркальное, от внутренней поверхности – дифракция. Внутриобъёмное рассеяние – по Друде. Магнитное поле – отсутствует, электрическое поле – отсутствует. Внутриобъёмные геометрические размеры системы выбраны такими, которые на несколько порядков превосходят длину волны де Бройля пробной частицы. Одновременно резко увеличена и средняя длина свободного пробега этой частицы.
- Результаты: Объёмная концентрация частиц – пространственно неоднородна. Зависимость концентрации от значения радиальной координаты имеет такой же качественный вид, который был ранее предсказан теоретически. Статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца – отсутствуют.

- Примечания: Выполнен вариант имитационного эксперимента, реализованный для случая совершенно оправданной применимости смешанного описания динамики пробной частицы. Данные изменения в параметрах модели не повлияли на качественное содержание полученных результатов: принципиальное значение в изучаемых системах имеет квантовый характер именно актов рассеяния частиц; на участках же свободного пробега – динамику этих частиц вполне допустимо описывать классическим образом, т. е. «траекторными» методами.

Эксперимент "QCD-X1(N6)" (рис. 4.9 на стр. 116)

- Цель эксперимента: Проверка обоснованности теоретических выводов, полученных в данной работе. Проверяется также обоснованность применения *смешанного* описания динамики пробной частицы, использованного в настоящей модели.
- Свойства системы: Свойства моделируемого объекта соответствуют свойствам неэргодической системы, приведённой на рис. 3.20, стр. 94. Отражение частицы от внешней поверхности – практически зеркальное, от внутренней поверхности – дифракция. Внутриобъёмное рассеяние – по Друде. Геометрические размеры объёма системы выбраны такими, которые на несколько порядков превосходят длину волны де Бройля пробной частицы. Одновременно резко увеличена и средняя длина свободного пробега этой частицы. Магнитное поле – имеется, но его величина очень невелика (чтобы обеспечить лишь требуемую степень «замагниченности» электронного газа: $\omega \cdot \tau \approx 1$). Электрическое поле – отсутствует.
- Результаты: Объёмная концентрация частиц – пространственно неоднородна. В системе имеются статистически значимые явления переноса, направленные вдоль оси симметрии "Z" образца. Данные явления имеют ранее предсказанный вид.
- Примечания: Выполнен вариант имитационного эксперимента, реализованный для случая совершенно оправданного использования смешанного описания динамики пробной частицы. Соответствующие изменения в параметрах модели не повлияли на качественный характер полученных результатов. Кроме того, показана возможность эффективного применения весьма низких значений магнитной индукции в системе. Из этого следует, что здесь не является принципиально необходимым учёт в имитационной модели таких эффектов, как расщепление энергетического спектра пробной частицы на уровни Ландау, магнитный пробой и т. п. Таким образом, с точки зрения анализа изучаемых явлений, электрон проводимости вполне допустимо рассматривать, как классическую бесспиновую частицу, имеющую электрический заряд (разумеется, лишь на участках его свободного пробега).

Краткое обобщение содержания главы № 4

- Результаты выполненных имитационных экспериментов полностью соответствуют ранее высказанным теоретическим предположениям (подробнее – см. ниже).
- Характер реализации наиболее вероятных (равновесных) макроскопических состояний исследуемых физических систем совпадает с ожидаемым: зафиксировано наличие устойчивого пространственного градиента объёмной концентрации частиц квантового газа, пребывающего в замкнутой системе (какие-либо потенциальные поля – отсутствуют). Указанная концентрация возрастает по мере приближения к поверхностям, дифракционно рассеивающим частицы находящегося в системе газа.
- Подтверждено существование стационарных процессов направленного переноса электронов проводимости в моделируемых системах. Такой перенос является ярко выраженным размерным эффектом, который возникает при воздействии внешнего статического магнитного поля на образец полупроводника с особым типом границ.
- Масштаб макроскопических эффектов, регистрируемых в ходе имитационных экспериментов, свидетельствует о безусловной практической значимости моделируемых процессов. Указанная значимость, по всей видимости, сохранится даже в случае весьма неблагоприятного сочетания каких-либо негативных факторов, которые могут проявить себя в реальной ситуации (при этом, разумеется, общая схема физического эксперимента должна иметь достаточно оптимальный характер).

В нижеследующем разделе "Заключение" подытожено состояние проекта "Euler", каковым оно представляется на момент написания (31.07.2006) этой редакции работы¹.



¹ См. также актуальную версию настоящих материалов в [54].

Заключение

1. Теоретически доказана возможность существования замкнутых физических систем, наиболее вероятные макроскопические состояния которых не являются состояниями *детального* равновесия: для них не выполняется основополагающая гипотеза статистической физики о равновероятности всех образующих их микросостояний.
2. Установлено, что вышеуказанные свойства должны быть характерны для физических систем в таких предметных областях, как твёрдотельная электроника, квантовая оптика и молекулярная динамика, когда имеет место упругое волновое рассеяние (дифракция) газа квантовых частиц (электронов проводимости, фотонов электромагнитного излучения или молекул газа) на границах заполняемого ими объёма.
3. С целью изучения свойств вышеупомянутых наиболее вероятных макроскопических состояний замкнутых систем — были осуществлены работы по численному имитационному моделированию динамики электронов проводимости в ограниченных полупроводниках. На основании полученных результатов предсказано существование новых, неизвестных до настоящего момента, термомагнитных эффектов.
4. Указанные в пункте 3 новые термомагнитные эффекты принципиально позволяют осуществить *полное* преобразование кинетической энергии теплового движения молекул кристалла полупроводника в другие виды энергии. Очень важно отметить, что такой процесс не противоречит H -теореме Больцмана статистической физики (феноменологическим аналогом данной теоремы является второй закон термодинамики), так как выводы любой научной теории применимы только лишь к тем явлениям, для которых заведомо справедлива аксиоматика (т. е. основополагающие гипотезы, принимаемые без какого-либо доказательства) соответствующей теории¹. Поскольку, как это видно из пункта 1, для рассматриваемых в настоящей работе систем аксиоматика статистической физики не справедлива, то и корректное описание исследуемых процессов не может быть осуществлено в границах применимости статистической физики и её феноменологического аналога — термодинамики.
5. Автором был предложен ряд различных конструктивных вариантов принципиально новых теплоэнергетических устройств с особыми свойствами², которые могут быть практически реализованы в случае успешной экспериментальной проверки (на реальных физических объектах) всех вышеприведённых теоретических результатов.

¹ В качестве примера можно привести специальную теорию относительности, которая, в отличие от механики Ньютона, правильно описывает динамику движущихся тел при скоростях, близких к скорости света. Однако это не означает, что выводы теории относительности противоречат классическим законам Ньютона. Дело в том, что классические и релятивистские законы основываются на разных постулатах, предполагающих весьма различные свойства пространства и времени. В границах применимости соответствующих постулатов механика Ньютона столь же корректно описывает свойства динамических систем, как и специальная теория относительности Эйнштейна.

² Такого рода устройства в случае своего осуществления явились бы неограниченно возобновляемыми (при внешней температуре выше абсолютного нуля) источниками энергии, для работы которых характерно полное отсутствие какого-либо теплового, химического или радиационного загрязнения окружающей среды.

Список использованных источников

01. *Анраде Э Силва Ж. Л., Лошак Ж.* Поля, частицы, кванты. – М.: Наука, 1972. – 189 с.
02. *Ансельм А. И.* Основы статистической физики и термодинамики. – М.: Наука, 1973. – 423 с.
03. *Базаров И. П., Геворкян Э. В., Николаев П. Н.* Термодинамика и статистическая физика (теория равновесных систем). – М.: изд-во Московского Университета, 1986. – 310 с.
04. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1983. – 664 с.
05. *Блохинцев Д. И.* Принцип детального равновесия и квантовая механика // ЖЭТФ 17, 924 (1947).
06. *Бом Д.* Квантовая теория. – М.: Наука, 1965. – 727 с.
07. *Нильс Бор.* Атомная физика и человеческое познание. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 151 с.
08. *Макс Борн.* Физика в жизни моего поколения. – М.: Издательство иностранной литературы, 1963. – 535 с.
09. *Боровков А. А.* Теория вероятностей. – М.: Наука, 1986. – 431 с.
10. *Луи де Бройль.* Революция в физике. – М.: Издательство литературы Государственного Комитета по использованию атомной энергии СССР, 1963. – 231 с.
11. *Луи де Бройль.* Соотношения неопределённостей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики. – М.: Мир, 1986. – 340 с.
12. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. – М.: Наука, 1986. – 544 с.
13. *Вентцель А. Д.* Курс теории случайных процессов. – М.: Наука, 1975. – 319 с.
14. *Выгодский М. Я.* Справочник по высшей математике. – М.: Наука, 1975. – 871 с.
15. *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. – М.: Наука, 1988. – 548 с.
16. *Гнеденко Б. В.* Курс теории вероятностей. – М.: Наука, 1988. – 447 с.
17. *Гудман Ф., Вахман Г.* Динамика рассеяния газа поверхностью. – М.: Мир, 1980. – 423 с.
18. *Гуревич М. М.* Фотометрия. Теория, методы и приборы. – Л., Энергоатомиздат, 1983. – 268 с.
19. *Гуров К. П.* Основания кинетической теории. – М.: Наука, 1966. – 351 с.
20. *Забрейко П. П., Кошелев А. И., Красносельский М. А. и др.* Интегральные уравнения. – М.: Наука, 1968. – 448 с.
21. *Иванов А. П.* Оптика рассеивающих сред. – Минск, изд-во «Наука и техника», 1969. – 592 с.

22. *Исимару А.* Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах (Том 2: Многократное рассеяние, турбулентность, шероховатые поверхности и дистанционное зондирование). – М.: Мир, 1981. – 317 с.
23. *Киттель Ч.* Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 336 с.
24. *Кнут Д.* Искусство программирования для ЭВМ (Том 2: Получисленные алгоритмы). – М.: Мир, 1977. – 724 с.
25. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1984. – 831 с.
26. *Крылов Н. С.* Работы по обоснованию статистической физики. – М.-Л.: Издательство АН СССР, 1950. – 207 с.
27. *Кубо Р.* Статистическая механика. – М.: Мир, 1967. – 452 с.
28. *Либов Р.* Введение в теорию кинетических уравнений. – М.: Мир, 1974. – 371 с.
29. *Мурзаков В. В.* Основы технической термодинамики. – М.: Энергия, 1973. – 303 с.
30. *Перспективы квантовой физики (сборник статей японских учёных, посвящённый полувековому юбилею развития квантовой механики).* – Киев, издательство «Наукова думка», 1982. – 551 с.
31. *Прохоров Ю. В., Розанов Ю. А.* Теория вероятностей. Основные понятия. Предельные теоремы. Случайные процессы. – М.: Наука, 1987. – 397 с.
32. *Рамзей Н.* Молекулярные пучки. – М.: Издательство иностранной литературы, 1960. – 411 с.
33. *Розанов Ю. А.* Теория вероятностей, случайные процессы и математическая статистика. – М.: Наука, 1989. – 312 с.
34. *Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш.* Термодинамика, статистическая физика и кинетика. – М.: Наука, 1972. – 400 с.
35. *Сапожников Р. А.* Теоретическая фотометрия. – М., Энергия, 1977. – 264 с.
36. *Сивухин Д. В.* Общий курс физики. Оптика. – М.: Наука, 1980. – 751 с.
37. *Синай Я. Г.* Динамические системы с упругими отражениями (эргодические свойства рассеивающих бильярдных) // Успехи математических наук, 1970, том XXV (март - апрель), вып. 2 (152), с. 141-192. (Поступило в редакцию 11 декабря 1969 г.)
38. *Сирота Н. Н.* Термодинамика и статистическая физика. – Минск, издательство «Вышэйшая школа», 1969. – 470 с.
39. *Соболь И. М., Статников Р. Б.* Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. – М.: Наука, 1981. – 110 с.
40. *Соболь И. М.* Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. – М.: Наука, 1969. – 288 с.
41. *Соболь И. М.* Численные методы Монте–Карло. – М.: Наука, 1973. – 311 с.
42. *Таблицы физических величин.* Справочник под редакцией Кикоина И. К. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.

43. *Тарасов Л. В.* Введение в квантовую оптику. – М.: Высшая школа, 1987. – 304 с.
44. *Толстов Г. П.* Ряды Фурье. – М.: Наука, 1980. – 381 с.
45. *Физические величины.* Справочник под ред. Григорьева И. С. и Мейлихова Е. З. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
46. *Хэкфорд Г. Л.* Инфракрасное излучение. – М.-Л.: Энергия, 1964. – 336 с.
47. *Чен Ф.* Введение в физику плазмы. – М.: Мир, 1987. – 398 с.
48. *Чопра К. Л.* Электрические явления в тонких плёнках. – М.: Мир, 1972. – 435 с.
49. *Эдвардс Р.* Ряды Фурье в современном изложении. – М.: Мир, 1985. – Т1: 260 с., Т2: 399 с.
50. *Электроны проводимости.* Сб. статей под ред. Каганова М. И. и Эдельмана В. С. – М.: Наука, 1985. – 416 с.
51. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. – М.: Мир, 1983. – Том 1: 364 с., Том 2: 410 с.
52. *Юу Ф. Т. С.* Введение в теорию дифракции, обработку информации и голографию. – М.: Советское радио, 1979. – 304 с.
53. *Яворский Б. М., Детлаф А. А.* Справочник по физике для инженеров и студентов вузов. – М.: Наука, 1974. – 942 с.
54. **Актуальная версия настоящих материалов в сети Internet:** <http://savukov.ru> или <http://savukov.net>



Приложение П1: Математические свойства закона Кнудсена

Cum principia negante non est disputandum¹

В настоящем приложении исследуется «физичность» кнудсеновской (ламбертовской) индикатрисы углового рассеяния частиц изотропного (диффузного) газа на некоторой поверхности. Под «физичностью» здесь подразумевается отсутствие качественных противоречий между теми формальными свойствами, которыми *всегда* обязан обладать *любой* частный вариант математически корректного описания такой индикатрисы рассеяния, и достоверно известными свойствами реальных физических систем.

Роль строго формального метода для анализа процесса рассеяния частиц

В данной работе ключевым по своей важности моментом является обоснование² авторского предположения о том, что дифракционное рассеяние квантовых частиц диффузного газа на упруго отражающей поверхности — принципиально не может осуществляться по закону Кнудсена (Ламберта). Все последующие практически значимые выводы проекта — это лишь простые технические следствия из упомянутого предположения (см. "Краткое обобщение содержания главы № 3" на стр. 101).

Между тем, опыт обсуждения рабочих материалов проекта "Euler" с различного рода специалистами зачастую выглядел, к сожалению, нижеописанным образом:

- Сначала неким экспертом выдвигается, например, вполне ожидаемое мнение о том, что исследовать процесс взаимодействия частиц со стенкой надо на основании, "как минимум, решения соответствующей квантовомеханической задачи рассеяния".
- Если указанное решение оппоненту предоставляется, то немедленно следует опять-таки абсолютно логичное заявление, что использованная в данном решении модель физического явления — не вполне точна³ в каких-то своих деталях. Следовательно, есть основания интерпретировать представленные в настоящей работе результаты

¹ "С отрицающим основы — не спорят" (лат). Известное философское изречение, означающее, что без согласия в основных посылах невозможен логический спор.

² Следует подчеркнуть, что при изложении этих материалов — никоим образом не ставилась цель *теоретически доказать* справедливость предлагаемых уточнений аксиоматических положений статистической физики. Никакая аксиоматика по своему изначальному смыслу не может быть обоснована или опровергнута на «платоническом» уровне, с помощью исключительно теоретических построений. Объективным критерием корректности новых аксиоматических гипотез может служить только их прямая проверка в надлежащем физическом эксперименте. Автор в настоящей работе стремится лишь показать, что выдвигаемые им теоретические предположения заслуживают такого рода экспериментальной проверки (см. Приложение П2 на стр. 161).

³ Такая неточность *обязательно* имеется *всегда*, поскольку всякая физическая модель базируется на определённой аксиоматике и обобщает ограниченный по объёму эмпирический опыт (см. Введение на стр. 4). Кроме того, строгое аналитическое решение большинства нетривиальных физических задач, как правило, отсутствует. Последствия же использования вынужденных приближений — обычно не являются вполне контролируемыми, что ещё более снижает достоверность конечного результата.

именно как проявление этих самых недостатков задействованной физической модели. Естественно, что при таком подходе конкретный выбор той физической модели, которая затем будет объявлена «недостаточно хорошей», не играет никакой роли.

В конечном итоге, оценка материалов проекта обычно носит субъективный характер и сводится к высказываниям, относящимся скорее к теологии, нежели к физике:

- **Вариант А:** *Я верю*, что теоретические выводы данной работы могут быть верны.
- **Вариант В:** *Я не верю*, что теоретические выводы данной работы могут быть верны.

Эта ситуация привела к осознанию необходимости «сугубо нефизического» звена в общей цепи предлагаемой аргументации. Иными словами, было бы крайне желательно выполнить (хотя бы частично) исследование процесса рассеяния *только* формальными средствами математического анализа, т. е. без привлечения аксиоматических постулатов физического характера. Ценность данного формально-математического подхода к решению поставленной задачи заключается в том, что получаемые при этом результаты не будут никак зависеть от неточностей тех физических моделей, которые должны были бы в противном случае привлекаться для анализа изучаемого явления¹.

Описание формальной математической модели процесса рассеяния

Будем рассматривать ситуацию на плоской (или локально плоской²) границе геометрического объёма³ замкнутой системы, заполненного диффузным газом частиц.

При построении модели рассеяния следует особое внимание уделить определению таких терминов, как «угол падения α » и «угол отражения β » частиц, а также уточнить тот смысл, который вкладывается в само понятие «процесса рассеяния». Дефиниция терминов «угол падения α » и «угол отражения β » квантовой частицы основана на предположении о справедливости следующего факта: существует функционально описанная *плотность вероятности* того, что вектор импульса данной частицы может иметь некоторую определённую угловую ориентацию в геометрическом пространстве⁴.

¹ Разумеется, и тут могут найтись критики, которые объявят такого рода методологию чересчур абстрактной и потому, на их взгляд, непригодной для «разбора конкретных физических задач». Однако, математика вообще наука абстрактная по своей природе, а «результат разбора конкретных задач» — всегда носит лишь частный характер...

² Всякий локальный участок макроповерхности можно считать достаточно плоским, если его размеры — существенно меньше радиуса кривизны этой макроповерхности.

³ Если система замкнута, то наличие у неё такого рода границ — строго обязательно. Также весьма важным является то обстоятельство, что площадь "S" каждой граничной поверхности имеет конкретное конечное значение.

⁴ Такая нормированная к единице функция плотности вероятности должна быть неотрицательной во всём диапазоне определения углов падения и отражения (кроме, разумеется, конечного множества точек, например, в рамках условий Дирихле). Вообще говоря, совершенно не обязательно, чтобы указанная функция формировалась в виде результата обобщения параметров движения совокупности *отдельных* частиц, каждая из которых имеет детерминированную угловую ориентацию вектора своего импульса. Данное определение плотности вероятности, интерпретируемое, например, как квадрат амплитуды реализации некоего волнового процесса, делает применимой предлагаемую модель даже для описания рассеяния акустических пакетов в сплошной среде.

Понятие же «процесса рассеяния частицы» предполагает лишь наличие стохастической функциональной зависимости между вероятностью события падения частицы на поверхность под углом " α ", и вероятностью последующего отражения этой частицы от поверхности под углом " β ". Частный случай указанной зависимости (событие падения под углом " α " – уже свершилось) называется *условной*¹ плотностью вероятности.

Указанный подход, вообще говоря, имеет предельно абстрактную математическую форму, которая принципиально не накладывает никаких ограничений на характер физической интерпретации моделируемого процесса рассеяния:

- В рамках широко распространённой «копенгагенской» интерпретации квантовой механики определение понятия «угла падения α » частицы на рассеивающую поверхность может быть дано на основании существования конкретной пространственной ориентации вектора импульса у так называемой «свободной» квантовой частицы², находящейся в своём «чистом состоянии»³. В таком состоянии все компоненты импульса частицы (а значит и угловая ориентация этого импульса) – известны точно, а пространственное положение частицы – не локализовано вовсе (принцип неопределённости Гейзенберга). Плотность вероятности движения рассеянной частицы под «углом отражения β » может быть интерпретирована, как плотность вероятности обнаружения⁴ соответствующей угловой ориентации импульса этой частицы в ходе надлежащего процесса измерения. Функция условной плотности вероятности рассеяния частицы, как процесса её перехода из одного квантового состояния в другое, может при этом быть истолкована в рамках модельных представлений матричной механики Гейзенберга⁵, о чём подробно говорилось в подглаве "Вероятность исхода индуцированного события квантового перехода" (стр. 25).
- В модели, основанной на выводах теоремы Эренфеста, рассматривается движение свободных частиц в удалённой зоне как движение квазиточечных волновых пакетов вдоль некоего подобия классических траекторий – по «траекторным трубкам» (см. подглаву "Неравновесные процессы", стр. 9). При этом интерпретация понятий «угла падения α » и «угла отражения β » частицы вообще не встречает никаких трудностей, поскольку такое модельное описание динамики частиц представляет собой

¹ Об *условной вероятности* по Байесу см. [09, стр. 35-36, 81], [12, стр. 443-444, 450], [16, стр. 312-315], [25, стр. 552], [31, стр. 109-115], [33, стр. 53-54, 64-66].

² *Свободной* считается в данном случае частица, пребывающая в *удалённой зоне*, т. е. в области геометрического пространства, удалённой от рассеивающей поверхности на расстояние, существенно большее, чем типичная де Бройлевская длина волны частиц.

³ Здесь под «чистым» состоянием частицы понимается такое состояние одночастичной системы, которое является максимально полным для заданных условий. В частности, для *свободной* частицы могут быть одновременно и абсолютно точно (без какой-либо вероятностной дисперсии) заданы все компоненты её импульса p_x , p_y и p_z . При этом координаты x , y и z частицы — оказываются совершенно неопределёнными, так как состояние системы описывается плоской волной де Бройля, и частица не имеет пространственной локализации [02, стр. 78], [10, стр. 175-176], [34, стр. 376-379].

⁴ Этой плотности вероятности соответствует квадрат модуля пси-функции $|\Psi|^2$ из уравнения Шредингера, описывающего динамику рассеянной квантовой частицы.

⁵ Это соответствует волновой дифракции частиц по Фраунгоферу, но не по Френелю.

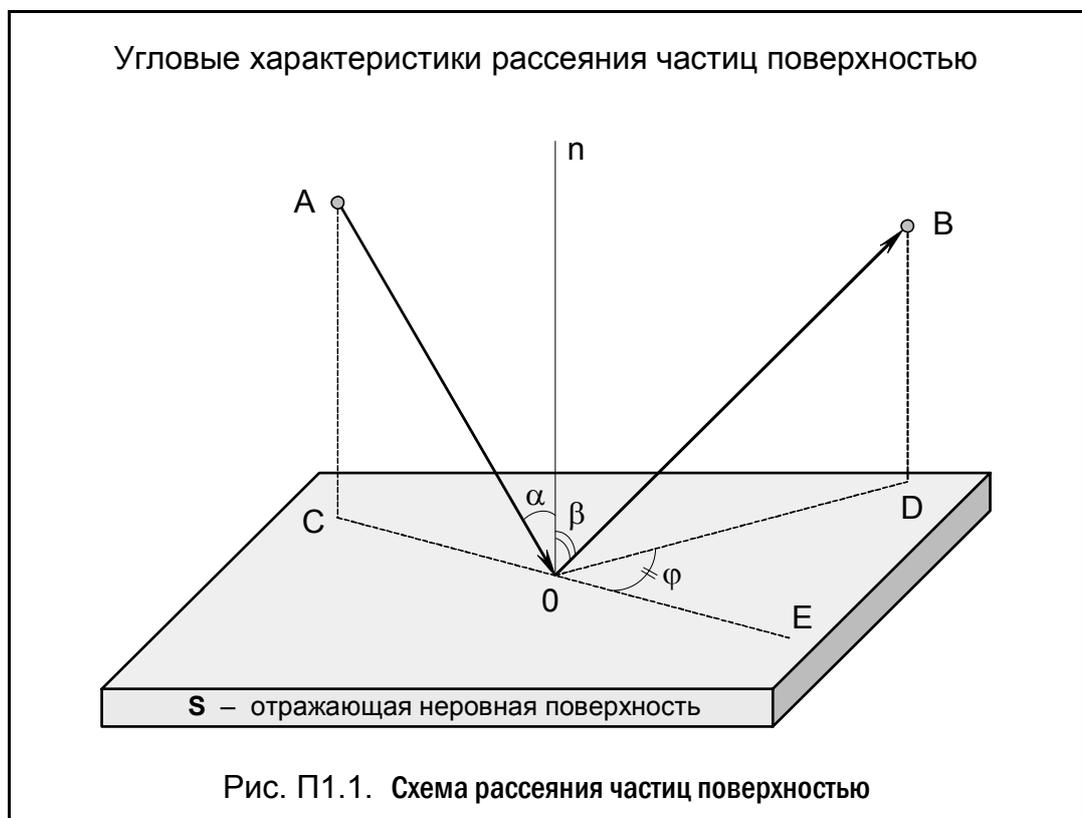
своего рода подмножество положений ортодоксальной копенгагенской школы, применяемое в рамках принципа соответствия Бора.

- Смешанное модельное описание является своеобразным симбиозом предельного варианта теоремы Эренфеста в сочетании с индетерминированным рассеянием частиц поверхностью: свободное движение частиц в удалённой зоне описывается полностью классическим образом (траекторный метод), а волновой характер процесса рассеяния частиц на поверхности определяется видом той стохастической функции, которая обуславливает вероятностную связь между углами падения и отражения.

Для удобства изложения очень кратко повторим здесь то, что уже говорилось по поводу математической модели рассеяния частиц в главе "2. Анализ выполнимости аксиоматических принципов" (стр. 18-61).

На рис. П1.1 изображена схема рассеяния единичной частицы отражающей поверхностью "S". Положение частицы до акта рассеяния обозначено как "A", после рассеяния – "B", условная точка соприкосновения частицы с поверхностью – "O". Углы падения " α " и отражения " β " частицы¹ отсчитываются относительно нормали "n-O" к плоскости, касательной к среднеинтегральному (на этом участке) уровню поверхности.

Азимутальный угол рассеяния " φ " здесь измеряется относительно плоскости падения "A-O-C" частицы, но иногда углы азимута характеризуются двумя значениями, определяемыми отдельно для плоскостей падения "A-O-C" и отражения "B-O-D". В последнем случае эти углы отсчитываются относительно некоторого фиксированного азимутального направления на поверхности "S".



¹ Иногда эти углы обозначают буквами " θ " и " ϑ ", что менее удобно из-за их сходства.

Рассмотрим теперь вероятностные характеристики рассеяния частиц диффузного (термодинамически равновесного) газа локально плоской поверхностью "S".

Некоторый ограниченный участок рассеивающей поверхности будем считать локально плоским в случае совместного выполнения двух нижеприведённых условий:

- a). Глубина микрорельефа рассматриваемого участка поверхности должна быть существенно меньше длины волны де Бройля, соответствующей нормальной к среднему уровню этого участка составляющей волнового вектора для большинства рассеиваемых квантовых частиц. Кроме того, будем считать, что упомянутый микрорельеф имеет однородную и хаотичную фактуру, т. е. его характеристики в среднем одинаковы вдоль любого азимутального направления, параллельного поверхности.
- b). Характерный радиус макроскопической (формообразующей для данного физического объёма) кривизны рассматриваемого участка поверхности – должен иметь бóльший порядок величины по отношению к размерам самого этого участка.

Если пространственная ориентация векторов скоростей всех частиц в рассматриваемом физическом объёме – изотропна, то усреднённая по совокупности всех допустимых значений угла азимута плотность вероятности того, что угол падения некоторой рассеиваемой частицы будет равен " α ", определяется следующим выражением:

$$f(\alpha) = \sin(2 \cdot \alpha) \quad (\text{П1.1})$$

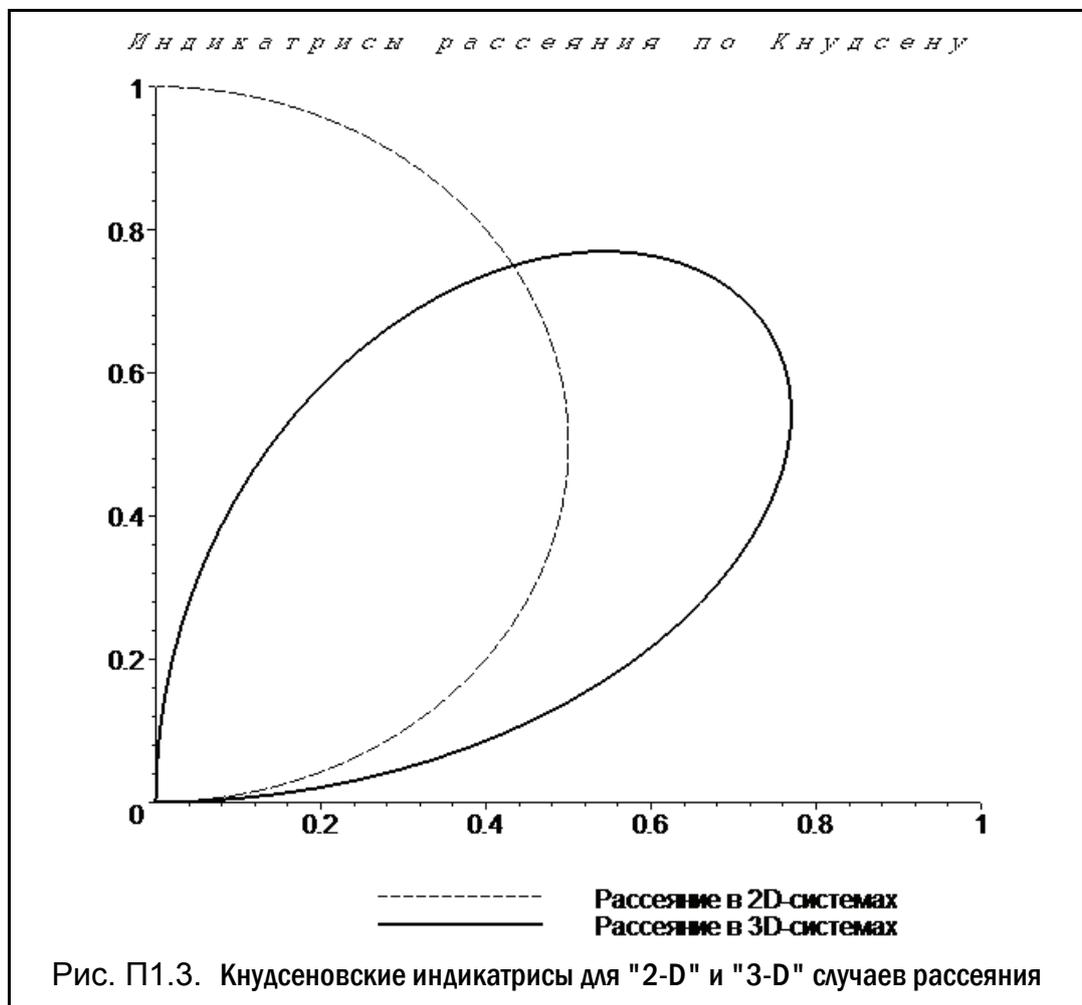
О причинах отличия зависимости (П1.1) от традиционной формы представления «косинусоидального закона» (см. формулу (2.1) на стр. 34) уже говорилось в подглавах "Вероятность индукции события квантового перехода" (стр. 31-35) и "Иллюстративное пояснение к законам Кнудсена и Ламберта" (стр. 35-41). В частности, необходимость учёта хорошо видимой на рисунке П1.2 зависимости размера элементарного телесного угла от текущего значения угла падения " α " — очевидна из формулы (2.6) на стр. 41.



Как видно из формулы (П1.1), при углах падения $\alpha \rightarrow +0$ или $\alpha \rightarrow \pi/2$ плотность вероятности уменьшается до нуля: $f(\alpha) \rightarrow +0$. В первом случае ($\alpha \rightarrow +0$) это объясняется стремлением к нулю той величины "приполярной" области телесных углов, внутри которой возможно нормальное (отвесное) движение в направлении поверхности "S" (см. рис. П1.2). Во втором же случае ($\alpha \rightarrow \pi/2$) уменьшение плотности вероятности объясняется стремлением к нулю нормальной к поверхности составляющей импульса частиц, которая, как известно, пропорциональна косинусу угла падения " α ".

В результате "противоборства" двух вышеописанных факторов плотность вероятности $f(\alpha)$ падения частиц на рассеивающую поверхность, получаемая после интегрирования по всем допустимым азимутальным направлениям $\varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$, имеет для 3D-систем максимум при $\alpha = \pi/4$, т. е. когда угол падения " α " равен 45° .

На рис. П1.3 в полярной системе координат изображены индикатрисы плотности вероятности взаимодействия частиц диффузного газа с поверхностью, – как для двумерного случая (пунктирная линия), так и для трёхмерных систем (сплошная линия).



Иными словами, наблюдатель, находящийся на погружённой в диффузный газ поверхности "S", чаще всего будет фиксировать падение частиц на данную поверхность под углом $\alpha = \pi/4$. Однако такой результат может быть получен только в том случае, если у частиц будут регистрироваться лишь их углы падения " α ", независимо от того, с каких азимутальных направлений эти частицы прибывают на поверхность.

Рассмотрим теперь те основные свойства, которыми обязано обладать любое математически корректное описание процесса рассеяния частиц поверхностью:

Согласно условию нормировки:
$$\int_0^{\pi/2} f(\alpha) \cdot d\alpha = 1 \quad (\text{П1.2})$$

Это означает абсолютную достоверность (с вероятностью, равной единице) того факта, что упавшая на поверхность частица имела *какой-то* угол падения " α ", принадлежащий допустимому диапазону $\forall \alpha \in [0, \pi/2)$. Здесь граничное значение угла падения, равное $\alpha = 0$, является формально возможным, хотя и бесконечно маловероятным. Другое граничное значение $\alpha = \pi/2$ — нереализуемо в принципе, поскольку для частицы, движущейся параллельно поверхности (в удалённой зоне), не может быть осуществлено событие столкновения данной частицы с указанной поверхностью.

Обозначим как $g(\beta|\alpha)$ условную плотность вероятности того, что частица, уже упавшая на поверхность при конкретном значении угла " α ", отразится от неё¹ под углом " β ". Тогда требование нормировки для $g(\beta|\alpha)$ можно записать так:

$$\int_0^{\pi/2} g(\beta|\alpha) \cdot d\beta = 1 \quad (\text{П1.3})$$

Это означает абсолютную достоверность (с вероятностью, равной единице) того факта, что рассеиваемая поверхностью частица будет иметь *какой-то* угол отражения " β ", принадлежащий допустимому диапазону $\forall \beta \in [0, \pi/2)$. Здесь граничное значение угла отражения, равное $\beta = 0$, является формально возможным, хотя и бесконечно маловероятным (для условной плотности вероятности угол падения $\alpha = 0$ может быть задан достоверно). Другое граничное значение $\beta = \pi/2$ — нереализуемо в принципе, поскольку для частицы, фактически оставшейся при данном " β " на поверхности (абсорбированной), отсутствует сам факт события рассеяния этой частицы в удалённую зону.

Смысл закона Кнудсена, выполняемого в среде диффузного газа, сводится к следующему: среднеинтегральная плотность вероятности того, что какая-либо частица, упавшая на поверхность под заранее неизвестным углом " α " $\Rightarrow \forall \alpha \in [0, \pi/2)$, отразится от этой поверхности под углом " β " $\Rightarrow \forall \beta \in [0, \pi/2)$, должна быть равна $f(\beta)$:

$$f(\beta) = \sin(2 \cdot \beta) = \int_0^{\pi/2} g(\beta|\alpha) \cdot f(\alpha) \cdot d\alpha \quad (\text{П1.4})$$

Функция $f(\beta)$, неявно содержащаяся в правой части уравнения (П1.4), не зависит от значения угла " α ". Поэтому данная функция представима в роли некоего постоянного коэффициента, который можно внести под знак интеграла:

$$f(\beta) = \int_0^{\pi/2} f(\beta) \cdot F(\alpha, \beta) \cdot f(\alpha) \cdot d\alpha, \quad (\text{П1.5})$$

где
$$f(\beta) \cdot F(\alpha, \beta) = g(\beta|\alpha) \quad (\text{П1.6})$$

¹ В общем случае — в произвольной азимутальной плоскости, т. е. $\varphi \Rightarrow \forall \varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$.

Разделим теперь правую и левую части уравнения (П1.5) на значение функции $f(\beta)$ ¹:

$$1 = \int_0^{\pi/2} F(\alpha, \beta) \cdot f(\alpha) \cdot d\alpha \quad (\text{П1.7})$$

Если теперь принять во внимание соотношения (П1.2) и (П1.7), то можно записать:

$$\int_0^{\pi/2} f(\alpha) \cdot d\alpha = \int_0^{\pi/2} F(\alpha, \beta) \cdot f(\alpha) \cdot d\alpha,$$

$$\text{Или:} \quad \int_0^{\pi/2} f(\alpha) \cdot [F(\alpha, \beta) - 1] \cdot d\alpha = 0. \quad (\text{П1.8})$$

$$\text{Теперь обозначим:} \quad R(\alpha, \beta) = F(\alpha, \beta) - 1, \quad (\text{П1.9})$$

$$\text{И, следовательно (см. (П1.6))}: \quad g(\beta|\alpha) = f(\beta) \cdot [R(\alpha, \beta) + 1]. \quad (\text{П1.10})$$

где функция $R(\alpha, \beta)$ – ортогональна плотности вероятности $f(\alpha)$ на интервале углов падения $\alpha \in [0, \pi/2)$, — см. (П1.8) и (П1.9).

Если теперь подставить (П1.10) в (П1.3), то получим условие нормировки:

$$\int_0^{\pi/2} f(\beta) \cdot [R(\alpha, \beta) + 1] \cdot d\beta = 1,$$

$$\text{Или:} \quad \int_0^{\pi/2} f(\beta) \cdot R(\alpha, \beta) \cdot d\beta + \int_0^{\pi/2} f(\beta) \cdot d\beta = 1. \quad (\text{П1.11})$$

Так как второе слагаемое в левой части уравнения (П1.11) на основании соотношения (П1.2) равно единице, то получаем второе условие ортогональности:

$$\int_0^{\pi/2} f(\beta) \cdot R(\alpha, \beta) \cdot d\beta = 0. \quad (\text{П1.12})$$

Из всего вышесказанного окончательно получаем систему соотношений:

$$\left. \begin{aligned} g(\beta|\alpha) &= f(\beta) \cdot [R(\alpha, \beta) + 1] \\ \int_0^{\pi/2} R(\alpha, \beta) \cdot f(\alpha) \cdot d\alpha &= 0 \\ \int_0^{\pi/2} R(\alpha, \beta) \cdot f(\beta) \cdot d\beta &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{П1.13})$$

Соотношения (П1.1) – (П1.13) являются минимальной базовой основой для последующего математического анализа любой возможной формы кнудсеновской индикатрисы рассеяния. Разумеется, есть ещё ряд ограничений, обусловленных физическим

¹ Очевидно, что стремление $1/f(\beta) \rightarrow +\infty$ при $\beta \rightarrow +0$ и $\beta \rightarrow \pi/2$ – не нарушает корректности результирующего уравнения (П1.7). Кроме того, правая граница диапазона $\beta \in [0, \pi/2)$ — вообще не входит в область допустимых значений угла "β".

смыслом функции $g(\beta|\alpha)$, а именно: требование неотрицательности и непрерывности (однозначности) плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ во внутренней области определения углов " α " и " β " (это не исключает возможности наличия разрывов функции $g(\beta|\alpha)$ на границах данной области, что необходимо будет учесть в дальнейшем).

$$\left. \begin{aligned} g(\beta|\alpha) = \sin(2 \cdot \beta) \cdot [R(\alpha, \beta) + 1] \geq 0 \quad \text{для} \quad \forall \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right), \quad \forall \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right); \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} [g(\beta + \varepsilon|\alpha)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} [g(\beta - \varepsilon|\alpha)] = g(\beta|\alpha) \quad \text{для} \quad \forall \alpha, \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right); \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} [g(\beta|\alpha + \varepsilon)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} [g(\beta|\alpha - \varepsilon)] = g(\beta|\alpha) \quad \text{для} \quad \forall \alpha, \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right); \\ \lim_{\alpha \rightarrow +0} [g(\beta|\alpha)] = g(\beta|\alpha = 0) \quad \text{для} \quad \forall \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right). \end{aligned} \right\} \text{(П1.14)}$$

К ограничениям (П1.14) можно было бы добавить и требование по реализации детального равновесия в среде диффузного газа, выраженное в форме строгого тождества нижеприведённых полных (не условных) плотностей вероятности:

$$f(\alpha) \cdot g(\beta|\alpha) \equiv f(\beta) \cdot g(\alpha|\beta)$$

С учётом определения (П1.10) вышеуказанное требование выглядит так:

$$R(\alpha, \beta) \equiv R(\beta, \alpha) \quad \text{для} \quad \forall \alpha, \beta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right) \quad \text{(П1.15)}$$

Однако, принимая во внимание принцип неразличимости идентичных частиц в квантовых системах, условие (П1.15) следует считать излишне жёстким, так как реализация равновесного состояния в диффузной среде не детальным, а глобальным образом, никак не отразится на макроскопических характеристиках рассматриваемой системы.

Попробуем теперь выяснить, что может конкретно собой представлять функциональная зависимость (П1.10), описывающая условную плотность вероятности $g(\beta|\alpha)$.

Будем исходить из того, что функция плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ отвечает условиям Дирихле. Это, в свою очередь, означает, что во всех точках своего определения вышеуказанная функция имеет ограниченную вариацию, т. е. она не имеет разрывов второго рода; число же разрывов первого рода и число экстремумов (если таковые имеются) — является конечным для всего диапазона представления аргументов $\forall \alpha, \beta \in [-\pi, +\pi)^1$.

С учетом свойства интегрируемости (П1.3), имеющего место по определению данной зависимости (нормировка к единице), следует признать, что, по крайней мере, метрически эквивалентное [25, стр. 458] приближение функции $g(\beta|\alpha)$ может быть представлено в форме надлежащего ортогонального ряда [12, стр. 418].

¹ Заметим, что указанный диапазон существенно шире того, который обусловлен физическим смыслом функции $g(\beta|\alpha)$: $\forall \alpha, \beta \in [0, \pi/2)$. О причинах такой разницы в значениях границ допустимых диапазонов аргументов — далее будет сказано особо.

В правой части формулы (П1.10) функция $R(\alpha, \beta)$ является варьируемой по своему математическому представлению компонентой, минимальный набор обязательных свойств которой определён условиями ортогональности (П1.13). Поскольку присутствующая здесь в качестве сомножителя функция $f(\beta) = \sin(2 \cdot \beta)$, как и $g(\beta|\alpha)$, соответствует условиям Дирихле на ограниченном диапазоне $\forall \beta \in [-\pi, +\pi)$, то и вспомогательная функция $R(\alpha, \beta)$ также должна подчиняться условиям Дирихле, а значит, она может быть разложена в двойной ряд Фурье на естественном (с точки зрения периодичности) для углов падения и отражения интервале от $-\pi$ до $+\pi$ [44, стр. 216]¹:

$$R(\alpha, \beta) = \sum_{j=0,1,\dots}^{\infty} \sum_{k=0,1,\dots}^{\infty} [\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta)] + \sum_{m=0,1,\dots}^{\infty} \sum_{k=0,1,\dots}^{\infty} [\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta)] + \sum_{j=0,1,\dots}^{\infty} \sum_{n=0,1,\dots}^{\infty} [\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta)] + \sum_{m=0,1,\dots}^{\infty} \sum_{n=0,1,\dots}^{\infty} [\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta)] \quad (\text{П1.16})$$

Следует заметить, что указанное предположение о конкретной величине периода функции $R(\alpha, \beta)$, – не имеет принципиального значения, так как её реальный период определяется дискретным набором разрешённых (по условиям ортогональности) целочисленных гармоник и, как будет показано далее, этот период равен "π". Таким образом, разложение рассматриваемой функции $R(\alpha, \beta)$ можно было бы осуществить и не задаваясь каким-либо априорным представлением о конкретной величине её периода. Изначально рассматриваемый набор возможных гармоник мог бы иметь максимально широкий (непрерывный) спектр, выраженный через интеграл Фурье [12, стр. 425].

Очевидно, что на основании условий (П1.13) какой-либо ряд вида (П1.16) будет всегда (при любом сочетании коэффициентов Фурье) ортогонален функции $f(\alpha)$ на интервале $\alpha \in [0, \pi/2)$ и функции $f(\beta)$ на интервале $\beta \in [0, \pi/2)$ только в том случае, когда свойствами ортогональности будет обладать каждая отдельно взятая гармоническая компонента (гармоника) данного ряда, а точнее — тригонометрический сомножитель в этой отдельной компоненте, зависящий от соответствующего аргумента.

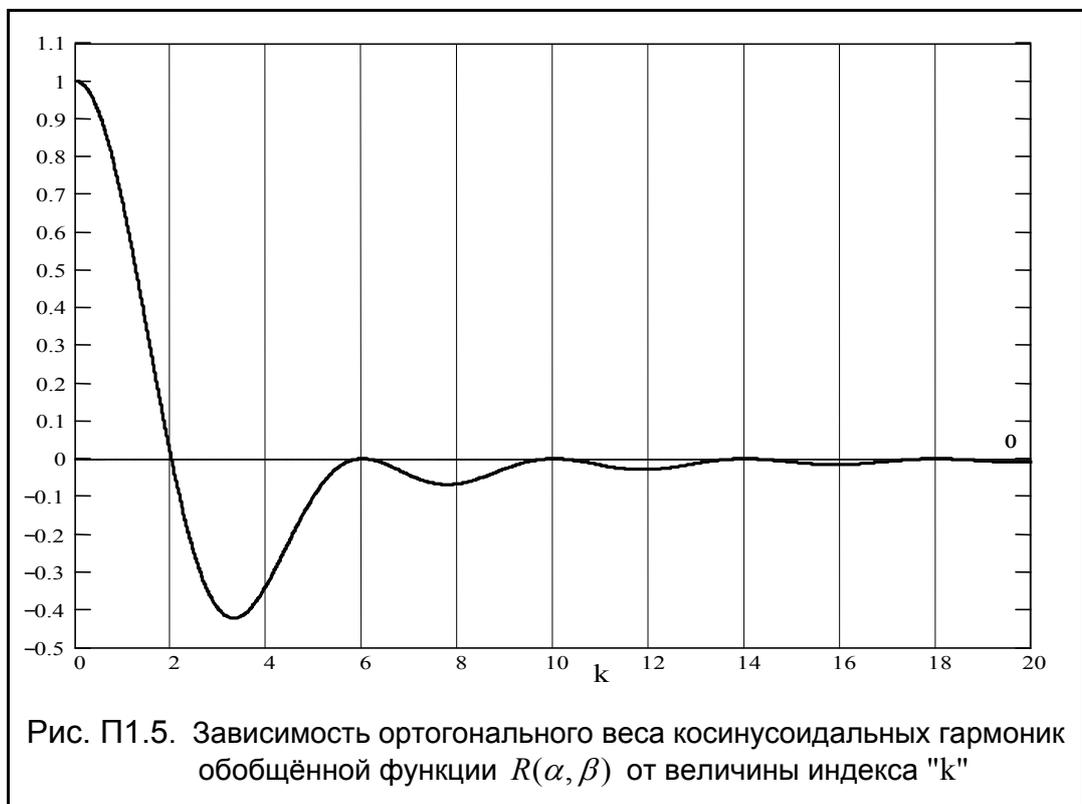
Найдём допустимые значения индексов "m", "n", "j" и "k" для тех коэффициентов Фурье, при использовании которых будут безусловно выполняться условия ортогональности (П1.13) рядов вида (П1.16). Уравнение (П1.17) определяет для $R(\alpha, \beta)$ набор разрешённых синусоидальных гармоник, уравнение (П1.18) – косинусоидальных:

$$\underbrace{\int_0^{\pi/2} \sin(n \cdot x) \cdot f(x) \cdot dx = \frac{2}{4 - n^2} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2} \cdot n\right)}_{\text{Равно нулю при: } n = 4, 6, 8, \dots, +\infty} = 0 \quad (\text{П1.17})$$

$$\underbrace{\int_0^{\pi/2} \cos(k \cdot x) \cdot f(x) \cdot dx = \frac{2}{4 - k^2} \cdot \left[\cos\left(\frac{\pi}{2} \cdot k\right) + 1 \right]}_{\text{Равно нулю при: } k = 2, 6, 10, \dots, +\infty} = 0 \quad (\text{П1.18})$$

¹ В формуле (П1.16) опущены специальные множители при коэффициентах Фурье, соответствующие тем случаям, когда один или оба индекса какого-либо коэффициента равны нулю. Как это будет показано далее, соответствующие гармоники всё равно должны быть исключены из итогового выражения для $R(\alpha, \beta)$.

На рисунках П1.4 и П1.5 — дана графическая иллюстрация полученных решений.



Выражения (П1.17) и (П1.18) накладывают соответствующие ограничения на допустимые значения индексов в формуле (П1.16) для общего вида $R(\alpha, \beta)$:

$$R(\alpha, \beta) = \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} [\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta)] + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} [\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta)] + \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} [\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta)] + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} [\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta)] \quad (\text{П1.19})$$

Таким образом, величина периода функции $R(\alpha, \beta)$, как это уже отмечалось ранее, действительно получается равной " π " (все допустимые значения индексов "m", "n", "j" и "k" – только чётные). Свойства же ортогональности (П1.13) для $R(\alpha, \beta)$, также как и условия неотрицательности и однозначности (П1.14) для плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$, распространяются лишь на половину протяжённости реального периода " π ", поскольку вышеуказанные зависимости имеют физический смысл лишь на интервале $\alpha, \beta \in [0, \pi/2)$. Тем не менее, какие-либо дополнительные сокращения разрешённого спектра гармоник из (П1.19), обусловленные «физическими» ограничениями ОДЗ аргументов " α " и " β ", являются заведомо не корректными.

Действительно, такого рода сокращение накладывает дополнительные ограничения на вид той обобщённой функции $R(\alpha, \beta)$, которая описывается в (П1.19) с помощью двойного ряда Фурье-Шварца [49, том 2, стр. 59-60]. Наличие данных ограничений также лимитирует и допустимый вид плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$, что может привести к появлению неких дополнительных свойств, обязательных для любых разрешённых реализаций кнудсеновских индикатрис. Однако, уже имеющиеся ограничения (П1.17) и (П1.18) спектра гармоник и так делают ортонормированную систему тригонометрических функций, используемую для аппроксимации $R(\alpha, \beta)$, *неполной* [12, стр. 75, 145-148] при разложении на интервале $\alpha, \beta \in [0, \pi/2)$. Ещё большее сокращение данного спектра, осуществляемое «по интервальным мотивам», может привести к появлению неоправданно жёстких добавочных ограничений допустимого вида индикатрис рассеяния $g(\beta|\alpha)$. Поэтому в проводимом анализе решено (из соображений перестраховки) использовать лишь самый необходимый минимум ограничительных условий, накладываемых на изучаемые объекты¹. Такой подход гарантирует высокую достоверность результатов, которые могут иметь место даже в случае столь избыточно свободного описания кнудсеновских индикатрис.

Кроме того, использование всех без исключения гармоник, формально разрешённых условиями ортогональности (П1.13), в данном конкретном случае имеет ещё один благоприятный аспект: ОДЗ аргументов практически значимого интервала функции $R(\alpha, \beta)$ – в два раза меньше её реального математического периода " π ". Это несколько притупляет те проблемы дальнейшего анализа, которые обусловлены так называемым «явлением Гиббса» [25, стр. 160]. Указанное явление предполагает существенное увеличение амплитуды осцилляций гармонических рядов вблизи точек разрывов² у

¹ По этой же причине в число основных свойств (П1.13) не было, например, включено ранее упоминавшееся условие детального равновесия (П1.15) и, даже, условие строгой неотрицательности плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$, описанное в (П1.14). Как будет очевидно из дальнейшего, такая особая осторожность окажется совсем не лишней.

² Эта проблема имеет особое значение при численном исследовании функций, когда приходится анализировать свойства заведомо частичных сумм для рядов Фурье.

приближаемых функций. Такая осцилляция становится особенно интенсивной, если, например, две точки, лежащие на границах ОДЗ аргументов (скажем, при $\alpha \rightarrow +0$ и $\alpha \rightarrow \pi/2$), не только соответствуют разрыву функции в "различных направлениях", но при этом упомянутые точки ещё и совпадают друг с другом. Последний случай, однако, возможен лишь тогда, когда размер периода $R(\alpha, \beta)$ равен размеру ОДЗ аргументов. Но, как уже было подчёркнуто ранее, в текущей задаче эти размеры отличаются друг от друга вдвое.

На основании всего сказанного окончательно можно констатировать следующее:

- Любое формально правильное математическое описание условной плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ для кнудсеновского рассеяния диффузного газа некоторой поверхностью может быть выражено в виде зависимостей (П1.1), (П1.10) и (П1.19). Исключение составляет случай зеркального отражения, где ввиду наличия разрывов второго рода нарушается условие Дирихле: $g(\beta|\alpha) = \delta(\alpha - \beta)$ – функция Дирака.
- Условия неотрицательности¹ и непрерывности (П1.14) условной плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$, равно как и условие соблюдения² детального равновесия (П1.15), должны рассматриваться в качестве дополнительных. Их применение накладывает неоправданно жёсткие ограничения на возможный вид функции $g(\beta|\alpha)$.

В заключение отметим, что исходное уравнение (П1.4), использованное для получения условий ортогональности (П1.13), по форме представляло собой не что иное, как интегральное уравнение Фредгольма второго рода с неотрицательным осцилляционным ядром, нормированным к единице [20, стр. 14, 77-94]. Однако здесь при получении (П1.13) решалась задача, обратная традиционной: на основании известного вида функции $f(\alpha)$ определялась возможная форма представления ядра $g(\beta|\alpha)$, точнее форма варьируемой компоненты $R(\alpha, \beta)$, входящей в состав этого ядра, – см. (П1.19).



¹ Можно было бы представить выражение $R(\alpha, \beta) + 1$, как неотрицательно определённую квадратичную форму, обладающую надлежащими свойствами симметрической матрицы своих коэффициентов [15, стр. 251-262]. Это позволило бы наложить особые ограничения и на значения коэффициентов Фурье, при которых $R(\alpha, \beta) + 1 \geq 0$. Но условия Дирихле допускают $R(\alpha, \beta) + 1 < 0$ – для конечного числа точек разрыва.

² Заметим, что условие детального равновесия (П1.15) будет иметь место при наличии следующих свойств у коэффициентов Фурье обобщённой функции $R(\alpha, \beta)$:

- а). Матрица коэффициентов $\mathbf{A}_{j,k}$ должна быть симметрической, т. е. при любых допустимых значениях индексов должно выполняться равенство: $\mathbf{A}_{j,k} = \mathbf{A}_{k,j}$;
- б). Матрица коэффициентов $\mathbf{d}_{m,n}$ должна быть симметрической, т. е. при любых допустимых значениях индексов должно выполняться равенство: $\mathbf{d}_{m,n} = \mathbf{d}_{n,m}$;
- в). Матрицы коэффициентов $\mathbf{b}_{m,k}$ и $\mathbf{c}_{j,n}$ должны быть взаимно транспонированными, т. е. для любых допустимых значений индексов: $\mathbf{b}_{m,k} = \mathbf{c}_{k,m}$.

Обязательные свойства, присущие формальной модели рассеяния

При анализе обобщённой функции, описывающей допустимые реализации индикатрисы кнудсеновского рассеяния $g(\beta|\alpha)$, было получено множество весьма интересных доказательств её «нефизичности», одно¹ из которых здесь и представлено.

Изучение обобщённых функциональных зависимостей, аппроксимируемых осциллирующими рядами (например, двойным рядом Фурье-Шварца, как в нашем случае [49, том 2, стр. 59-60]), обычно выполняется на уровне анализа неких интегральных функционалов, построенных с использованием вышеуказанных зависимостей. Это вызвано тем, что для такого рода аппроксимирующих приближений условия *сходимости в среднем* реализуются принципиально проще (а, значит, они будут справедливы и для более разнообразного подмножества изучаемых функций), чем условия *поточечной сходимости*. В результате даже при наличии определённых отклонений (в конечном множестве точек) от приближаемой зависимости², интегральные характеристики аппроксимирующего ряда — гарантированно точно совпадают с соответствующими характеристиками моделируемой функции³ [49, том 1, стр. 12-19].

Дадим определение двум разным интегральным функционалам $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$, описывающим среднеинтегральные вероятности рассеяния некоторой единичной частицы в ограниченные коническими поверхностями телесные углы. Причём известно, что в обоих случаях частица падает на отражающую поверхность под заданным углом " α ", но положение телесных углов рассеяния отличается для каждого из функционалов:

- Частица рассеивается с вероятностью $P(\alpha)_{top}$ в конический телесный угол⁴, ограниченный «приполярной» (см. рис. П1.2 на стр. 131) областью углов отражения " β ":

$$P(\alpha)_{top} = \int_0^{\varepsilon} g(\beta|\alpha) \cdot d\beta \quad \text{где } \beta \in (0, \varepsilon], \quad \varepsilon = Const \in (0, \pi/4]. \quad (\text{П1.20})$$

- Частица рассеивается с вероятностью $P(\alpha)_{bot}$ в конический телесный угол, ограниченный «экваториальной» областью углов отражения " β ":

$$P(\alpha)_{bot} = \int_{\pi/2-\varepsilon}^{\pi/2} g(\beta|\alpha) \cdot d\beta \quad \text{где } \beta \in [\pi/2 - \varepsilon, \pi/2), \quad \varepsilon = Const \in (0, \pi/4]. \quad (\text{П1.21})$$

Очевидно, что и сами *размеры* телесных углов, в которые учитывается "уход" частицы в «приполярном» и «экваториальном» вариантах рассеяния, являются разными функциями параметра " ε " (см. формулу (2.6) на странице 41). Но тем парадоксальнее результат, полученный далее при сравнении поведения функционалов $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$.

¹ Известно несколько сотен правильных вариантов доказательства теоремы Пифагора. Однако, для того, чтобы быть уверенным в справедливости выводов этой теоремы, вполне достаточно лишь какого-либо *одного* доказательства из уже имеющихся...

² *Производные* аппроксимирующего ряда, осциллирующего вокруг текущих значений исходной функции, — и вовсе мало похожи на производные исходной функции.

³ В общем случае, такого рода гарантия имеет место, если аппроксимирующий ряд не является почему-либо *внешне* ограниченным по числу своих элементов.

⁴ Т. е. возможно любое допустимое азимутальное направление «отскока»: $\varphi \in [0, 2 \cdot \pi)$.

Рассмотрим сначала вариант *асимметричного* расположения угла падения " α " частицы относительно сечений «приполярного» и «экваториального» телесных углов, в которые ведётся учёт её рассеяния: $P(\alpha)_{top} \equiv P(\alpha = \varepsilon)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot} \equiv P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon)_{bot}$.

Как можно убедиться¹, в этом случае всегда будет справедливым соотношение:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{P(\alpha = \varepsilon)_{top}}{P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon)_{bot}} \right) = 1 \quad (\text{П1.22})$$

Иначе говоря, вышеопределённая вероятность ухода отвесно падающей частицы ($\alpha = \varepsilon \rightarrow +0$) в «приполярный» телесный угол — строго равна² вероятности её ухода в «экваториальный» телесный угол в случае скользящего ($\alpha = \pi/2 - \varepsilon \rightarrow \pi/2$) падения. Указанное равенство вероятностей реализуется, даже не смотря на то, что относительный размер «экваториального» телесного угла имеет при $\varepsilon \rightarrow +0$ больший порядок величины, чем соответствующий размер «приполярного» телесного угла.

На рис. П1.6 приведена иллюстрация полученного результата. Здесь изображены графики функционалов $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$. Параметр " ε " варьируется от 0 до $\pi/4$.



¹ Автор из гуманных соображений не приводит здесь и далее те громоздкие математические выкладки, которые носят характер лишь тождественных преобразований.

² Равенство функционалов выявляется через предел их отношений при $\varepsilon \rightarrow +0$. Такая методика гарантирует корректный результат и при наличии разрывов в точке $\varepsilon = 0$. Эти разрывы будут иметь место, если при $\varepsilon \rightarrow +0$ в формуле (П1.10) множитель ограниченной вариации $R(\varepsilon, \varepsilon) + 1$ возрастает быстрее, чем убывает функция $f(\varepsilon)$.

Изображённые на рис. П1.6 графики, как и графики на последующих рисунках П1.7 – П1.11, относятся к модели индикатрисы $g(\beta|\alpha)$ со следующими параметрами:

- Порядок разложения компоненты $R(\alpha, \beta)$ в ряд Фурье-Шварца – 22.
- Коэффициенты Фурье инициализировались случайным образом. Генератор случайных чисел создавал нормально распределённые значения (нулевое математическое ожидание, единичная дисперсия) – отдельно для каждого из 256 коэффициентов.
- Какие-либо меры по соблюдению условия неотрицательности плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ при $\forall \alpha, \beta \in [0, \pi/2)$ не предпринимались. Поэтому значения функционалов $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$ не обязательно принадлежат диапазону от нуля до единицы.
- Также не соблюдались дополнительные ограничения, обусловленные требованиями непрерывности плотности вероятности (П1.14) и детального равновесия (П1.15).

Таким образом, равенство предельных значений вероятностей (П1.22) было получено на основе самого общего представления о функции кнудсеновского рассеяния $g(\beta|\alpha)$. Не учтённым, однако, осталось одно крайне важное в данном случае обстоятельство: функционалы $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$, описанные гармоническими рядами, могут иметь (это не значит, что непременно имеют) *разрывы* на границах ОДЗ углов " α " и " β ".

Для гарантии того, чтобы значения $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$ не могли «скакнуть в разные стороны» в окрестностях точки $\varepsilon \rightarrow +0$, необходимо также соблюдение равенства и первых производных исследуемых функционалов по параметру " ε ". Наличие такого равенства означало бы, что скорость изменения обоих функционалов в точке возможного разрыва — одинакова. Поскольку же на основании свойства (П1.22) одинаков и «пункт прибытия» данных зависимостей в точку возможного разрыва при $\varepsilon = 0$, то и «отправные точки» функционалов, предшествующие этому разрыву, будут совпадать.

Как можно убедиться, и эти первые производные функционалов – тоже равны:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d(P(\alpha = \varepsilon)_{top})/d\varepsilon}{d(P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon)_{bot})/d\varepsilon} \right) = 1, \quad (\text{П1.23})$$

Причём:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d(P(\alpha = \varepsilon)_{top})}{d\varepsilon} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d(P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon)_{bot})}{d\varepsilon} \right) = 0.$$

Проявляя вполне оправданный в данной ситуации максимализм, можно также проверить, как себя ведёт предел значений и вторых производных исследуемых функционалов. Двумерные графики зависимостей функционалов $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$ от параметра " ε " представляют собой плоские линии. Поскольку радиус кривизны плоской линии определяется значениями её первой и второй производных [14, стр. 500-503], то равенство между собой и вторых производных тоже — означало бы одинаковость размеров и радиусов кривизны указанных графиков в точке при $\varepsilon = 0$. Это же, в свою очередь, повысило бы надёжность ранее выведенных свойств (П1.22) и (П1.23), – они стали бы, например, заведомо справедливы и в отсутствие «минимизирующего» влияния сомножителя " $f(\varepsilon)$ " в формуле (П1.10) для условной плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$, стремящегося к нулю на границах ОДЗ " β ":

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (f(\varepsilon)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (f(\pi/2 - \varepsilon)) = 0.$$

Как, опять-таки, можно убедиться, и вторые производные функционалов тоже равны:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d^2 (P(\alpha = \varepsilon)_{top}) / d\varepsilon^2}{d^2 (P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon)_{bot}) / d\varepsilon^2} \right) = 1 \quad (\text{П1.24})$$

Совершенно аналогичные вышеприведённым результаты будут иметь место, если угол падения частицы " α " располагается *симметрично* внутри «приполярного» и «экваториального» телесных углов: $P(\alpha)_{top} \equiv P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot} \equiv P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}$.

В этом случае также справедливы все соотношения, подобные ранее выведенным для «асимметричного» варианта:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}}{P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}} \right) = 1 \quad (\text{П1.25})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d(P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}) / d\varepsilon}{d(P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}) / d\varepsilon} \right) = 1, \quad (\text{П1.26})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{d^2 (P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}) / d\varepsilon^2}{d^2 (P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}) / d\varepsilon^2} \right) = 1 \quad (\text{П1.27})$$

Далее, в дополнение к ранее приведённому рисунку П1.6, можно видеть изображённые на рис. П1.7 – П1.11 графики всех рассмотренных функций, которые численно иллюстрируют выявленные свойства функционалов $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$ при $\varepsilon \rightarrow +0$.







Численная проверка свойств формальной модели рассеяния

Специальные свойства (П1.22) – (П1.27), наличие которых является строго обязательным для любой математически корректной реализации кнудсеновской индикатрисы рассеяния, очень необычны по своему физическому смыслу. Поэтому представляется весьма желательным получение каких-либо дополнительных подтверждений того, что указанные свойства — действительно имеют место.

Такого рода подтверждением мог бы служить, например, результат исследования обобщённой индикатрисы $g(\beta|\alpha)$, выполненный с помощью методов, не использовавшихся при аналитическом выводе свойств (П1.22) – (П1.27). Естественно в качестве данной альтернативы выбрать один из численных методов исследования функций.

Конкретная цель проведённого исследования состояла в решении вариационной задачи по нахождению максимума предельного значения «экваториального» функционала $P(\alpha)_{bot} \equiv P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}$ для случая скользящего падения частицы:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\int_{\pi/2 - \varepsilon}^{\pi/2} g(\beta|\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2) \cdot d\beta \right) = Max \quad (П1.28)$$

При этом одновременно анализировалось поведение «приполярного» функционала $P(\alpha)_{top} \equiv P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}$, имеющее место для случая нормального (отвесного) падения частицы на рассеивающую поверхность:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\int_0^{\varepsilon} g(\beta|\alpha = \varepsilon/2) \cdot d\beta \right) = ? \quad (П1.29)$$

Конкретные значения коэффициентов Фурье, используемые при анализе предела (П1.29), берутся теми же, что получаются при решении вариационной задачи (П1.28). Если, например, выяснится, что пределы (П1.28) и (П1.29) всегда стремятся к одной и той же величине, то это, в свою очередь, будет означать автоматическое выполнение такого свойства исследуемых функционалов, как (П1.25), – см. стр. 143.

Между тем, в численном анализе могут быть использованы только конечные по числу своих элементов ряды Фурье. Поэтому величина предела (П1.28) – никогда не будет близка к единице. Более того, для ограниченных рядов этот предел вообще может стремиться к нулю. Для численного решения вариационной задачи типа (П1.28) больше подходит такой интегральный функционал¹, как, например, условное математическое ожидание $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ угла отражения "β", имеющее место при заданном значении угла падения "α", – см. формулу (П1.37) на стр. 148.

Кроме того, хотелось бы также иметь объективные подтверждения не только предполагаемого равенства пределов (П1.28) и (П1.29), означающего, как уже было сказано, выполнение свойства (П1.25). Весьма желательно было бы получить объективные подтверждения достоверности *всех* ранее полученных свойств (П1.22) – (П1.27), т. е. как пределов отношений самих исследуемых функционалов, так и пределов отношений их первых и вторых производных.

¹ При численном исследовании пределов (П1.28) и (П1.29) — действительно использовались некоторые вспомогательные функционалы (в том числе $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$), работа с которыми была по техническим причинам более удобной, чем с $P(\alpha)_{top}$ и $P(\alpha)_{bot}$.

Прежде, чем приступить непосредственно к этапу численного анализа, следует более подробно рассмотреть структуру обобщённой функции $R(\alpha, \beta)$, которая, собственно, и определяет все нетривиальные свойства индикатрисы рассеяния $g(\beta|\alpha)$.

Для начала заметим, что для каждого заданного значения угла падения " α " функцию $R(\alpha, \beta)$ можно представить в виде суммы двух других функций: $R_S(\alpha, \beta)$ и $R_M(\alpha, \beta)$, которые будут обладать, соответственно, чётными и нечётными свойствами относительно середины ОДЗ угла отражения " β " (т. е. относительно точки $\beta = \pi/4$):

$$\left. \begin{aligned} R(\alpha, \beta) &= R_S(\alpha, \beta) + R_M(\alpha, \beta), \\ R_S(\alpha, \beta) &\equiv R_S(\alpha, \pi/2 - \beta), \\ R_M(\alpha, \beta) &\equiv -R_M(\alpha, \pi/2 - \beta); \end{aligned} \right\} \text{ для } \forall \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right) \text{ и } \forall \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right) \quad (\text{П1.30})$$

где функции $R_S(\alpha, \beta)$ и $R_M(\alpha, \beta)$ равны:

$$\left. \begin{aligned} R_S(\alpha, \beta) &= \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right], \\ R_M(\alpha, \beta) &= \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta) \right] + \\ &+ \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right]. \end{aligned} \right\} (\text{П1.31})$$

Теперь представим для каждого заданного значения угла отражения " β " функцию $R_S(\alpha, \beta)$ – в виде суммы некоторых функций $R_{S0}(\alpha, \beta)$ и $R_{S1}(\alpha, \beta)$, а функцию $R_M(\alpha, \beta)$ – в виде суммы функций $R_{M0}(\alpha, \beta)$ и $R_{M1}(\alpha, \beta)$. Каждая такая новая пара функций будет обладать, в свою очередь, чётными и нечётными свойствами уже относительно середины ОДЗ угла падения " α " (т. е. относительно точки $\alpha = \pi/4$):

Разложение на чётную и нечётную компоненты вспомогательной функции $R_S(\alpha, \beta)$:

$$\left. \begin{aligned} R_S(\alpha, \beta) &= R_{S0}(\alpha, \beta) + R_{S1}(\alpha, \beta), \\ R_{S0}(\alpha, \beta) &\equiv R_{S0}(\pi/2 - \alpha, \beta), \\ R_{S1}(\alpha, \beta) &\equiv -R_{S1}(\pi/2 - \alpha, \beta); \end{aligned} \right\} \text{ для } \forall \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right) \text{ и } \forall \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right) \quad (\text{П1.32})$$

где функции $R_{S0}(\alpha, \beta)$ и $R_{S1}(\alpha, \beta)$, соответственно, равны:

$$\left. \begin{aligned} R_{S0}(\alpha, \beta) &= \sum_{m=6,10,\dots}^{\infty} \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right], \\ R_{S1}(\alpha, \beta) &= \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,8,\dots}^{\infty} \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right] \end{aligned} \right\} (\text{П1.33})$$

Разложение на чётную и нечётную компоненты вспомогательной функции $R_M(\alpha, \beta)$:

$$\left. \begin{aligned} R_M(\alpha, \beta) &= R_{M0}(\alpha, \beta) + R_{M1}(\alpha, \beta), \\ R_{M0}(\alpha, \beta) &\equiv R_{M0}(\pi/2 - \alpha, \beta), \\ R_{M1}(\alpha, \beta) &\equiv -R_{M1}(\pi/2 - \alpha, \beta). \end{aligned} \right\} \text{ для } \forall \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right) \text{ и } \forall \beta \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right) \quad (\text{П1.34})$$

где функции $R_{M_0}(\alpha, \beta)$ и $R_{M_1}(\alpha, \beta)$, соответственно, равны:

$$\left. \begin{aligned} R_{M_0}(\alpha, \beta) &= \sum_{m=6,10,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta) \right] + \sum_{m=6,10,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right], \\ R_{M_1}(\alpha, \beta) &= \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,8,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \cos(k \cdot \beta) \right] + \\ &+ \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right] + \sum_{m=4,8,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \sin(n \cdot \beta) \right]. \end{aligned} \right\} \text{(П1.35)}$$

Теперь у нас есть возможность для более объективной интерпретации результатов численного анализа. Действительно, появление воспроизводимых особенностей в значениях коэффициентов Фурье у каких-либо из строго определённых вспомогательных функций $R_{S_0}(\alpha, \beta)$, $R_{S_1}(\alpha, \beta)$, $R_{M_0}(\alpha, \beta)$ или $R_{M_1}(\alpha, \beta)$ – также даёт основания и для выводов относительно свойств всей обобщённой функции $R(\alpha, \beta)$. Однако эти выводы будут иметь более информативный характер, чем результаты, основанные исключительно на рассмотрении параметров исследуемых интегральных функционалов, так как в последнем случае одни и те же величины функционалов могут быть получены благодаря множеству бессистемных сочетаний конкретных значений коэффициентов Фурье.

Для численного решения вариационной задачи вида (П1.28) технически более удобно, как это уже говорилось ранее, использовать вместо стремящегося к нулю¹ предела функционала $P(\alpha)_{bot}$ надлежащий предел математического ожидания $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (\mathbf{M}(\beta|\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)) = Max \quad \text{(П1.36)}$$

Согласно определению, условное математическое ожидание $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ равно:

$$\mathbf{M}(\beta|\alpha) = \int_0^{\pi/2} \beta \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta \quad \text{(П1.37)}$$

С учётом ранее введённых определений (П1.10) и (П1.19), выражение для математического ожидания (П1.37) можно раскрыть следующим образом:

$$\mathbf{M}(\beta|\alpha) = \int_0^{\pi/2} \beta \cdot f(\beta) \cdot [1 + R(\alpha, \beta)] \cdot d\beta = \int_0^{\pi/2} \beta \cdot f(\beta) \cdot d\beta + \int_0^{\pi/2} \beta \cdot f(\beta) \cdot R(\alpha, \beta) \cdot d\beta,$$

где
$$\int_0^{\pi/2} \beta \cdot f(\beta) \cdot d\beta = \int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot d\beta = \frac{\pi}{4}.$$

Учитывая, что:
$$\sum_{n=4,6,\dots}^N \left[\int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = - \sum_{n=4,6,\dots}^N \left[\frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right],$$

А также:
$$\sum_{k=2,6,\dots}^K \left[\int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = \sum_{k=6,10,\dots}^K \left[\frac{\pi}{k^2 - 4} \right] - \frac{\pi}{16},$$

¹ Только для частичных сумм рядов Фурье, используемых в численных методах.

Окончательно получаем:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}(\beta|\alpha) &= \frac{\pi}{4} + \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = \\
 &= \frac{\pi}{4} + \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{a}_{j,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{a}_{j,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right] \right\} + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{b}_{m,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{b}_{m,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right] \right\} - \\
 &- \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} - \\
 &- \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} = \\
 &= \frac{\pi}{4} + \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{a}_{j,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{a}_{j,2} \cdot \frac{\pi}{16} - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{b}_{m,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{b}_{m,2} \cdot \frac{\pi}{16} - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

(П1.38)

Линейный характер зависимости функционала $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ от коэффициентов Фурье позволил для решения вариационной задачи (П1.36) использовать симплекс-метод. Условие неотрицательности функции $g(\beta|\alpha)$ – обеспечивалось через требование:

$$R(\alpha, \beta) + 1 \geq 0 \quad \text{для } \forall \alpha, \beta \in (0, \pi/2), \quad (\text{П1.39})$$

причём это неравенство реализовывалось посредством контроля над его выполнением в конечном числе точек, особым способом ("LPτ" – технология: [39, 40, 41]) распределённых в области допустимых значений углов падения "α" и углов отражения "β" частицы. Такая методика позволила осуществлять условие (П1.39) *нестрогим образом*, т. е. стало возможным *не запрещать* наличие разрывов первого рода (в рамках условий Дирихле) функции $R(\alpha, \beta)$ на границах ОДЗ её аргументов. Как будет показано далее, само такое допущение существования разрывов – имеет принципиальное значение.

Результатом решения вариационной задачи вида (П1.36), выполненной в форме поиска минимакса для нескольких разновидностей функционалов¹, явилось следующее:

- Глобальный оптимум, обеспечивающий наилучшее приближение свойств индикатрисы $g(\beta|\alpha)$ к физически реализуемым параметрам зеркального отражения частиц при скользящих углах их падения на поверхность ($\alpha \rightarrow \pi/2$), имеет место лишь при обязательном «занулении» коэффициентов Фурье для всех тех гармоник (и только для них), которые входят в состав функций $R_{S1}(\alpha, \beta)$ и $R_{M0}(\alpha, \beta)$:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (\mathbf{M}(\beta|\alpha = \pi/2 - \varepsilon)) = \text{Max} \text{ при } R_{S1}(\alpha, \beta) \equiv 0 \text{ и } R_{M0}(\alpha, \beta) \equiv 0 \text{ для } \forall \alpha, \beta \in (0, \pi/2) \quad (\text{П1.40})$$

- Свойство (П1.40) устойчиво проявляло себя при различных вариантах конкретных представлений обобщённой индикатрисы $g(\beta|\alpha)$, которые отличались друг от друга порядком разложения компоненты $R(\alpha, \beta)$ в ряд Фурье, наличием или отсутствием требований по выполнению условия детального равновесия (П1.15), и т. д.
- Причиной существования свойства (П1.40) заведомо не было требование равенства нулю функции $g(\beta|\alpha)$ в точках $\beta = 0$ или $\beta = \pi/2$, поскольку принятая методика решения вариационной задачи (П1.36) – допускала наличие разрывов первого рода у значений исследуемого функционала на границах ОДЗ его аргументов "α" и "β".

Надо сказать, что кроме вполне ожидаемого подтверждения² достоверности всех ранее выведенных аналитическими методами соотношений (П1.22) – (П1.27), численный результат (П1.40) позволяет предположить ещё более сильное проявлении эквивалентности свойств условной плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ в «приполярных» и «экваториальных» областях углов падения и отражения. Действительно, если справедливо свойство (П1.40), то следствием реализации «максимально зеркального» характера рассеяния частиц при скользящих углах их падения должно быть наличие зависимости:

$$g(\beta|\alpha) \equiv g(\pi/2 - \beta|\pi/2 - \alpha) \text{ для } \forall \alpha, \beta \in (0, \pi/2), \text{ – см. (П1.30), (П1.32) и (П1.34).}$$

Далее можно видеть изображённые на рисунках П1.12-П1.19 трёхмерные графики поверхностей отклика для индикатрисы рассеяния $g(\beta|\alpha)$, получаемые в результате численного решения вариационной задачи (П1.36) по нахождению максимума функционала $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$. Эта задача решалась для скользящих углов падения $\alpha \rightarrow \pi/2$ и при наличии ограничений вида (П1.39).

Рекомендуется обратить внимание на разрывы значений плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ на границах ОДЗ угла падения $\alpha \rightarrow +0$ и $\alpha \rightarrow \pi/2$. Эти разрывы становятся всё более существенными по мере увеличения порядка разложения компоненты $R(\alpha, \beta)$ в ряд вида (П1.19), – см. стр. 138.

¹ Не только имеющих вид математического ожидания (П1.37), но также и для других подходящих зависимостей, например, для функционалов типа (2.13), – см. стр. 59.

² Имеется весьма осторожная концепция, согласно которой всякий результат любого численного анализа имеет лишь частный характер, а потому принципиально не может быть использован для *подтверждения* каких-либо обобщающих умозаключений. Между тем численные методы вполне пригодны для того, чтобы *опровергнуть* некое ошибочное общее утверждение. С данной точки зрения результат численного анализа (П1.40), как минимум, не опровергает выводы (П1.22) – (П1.27). Спасибо и на этом...

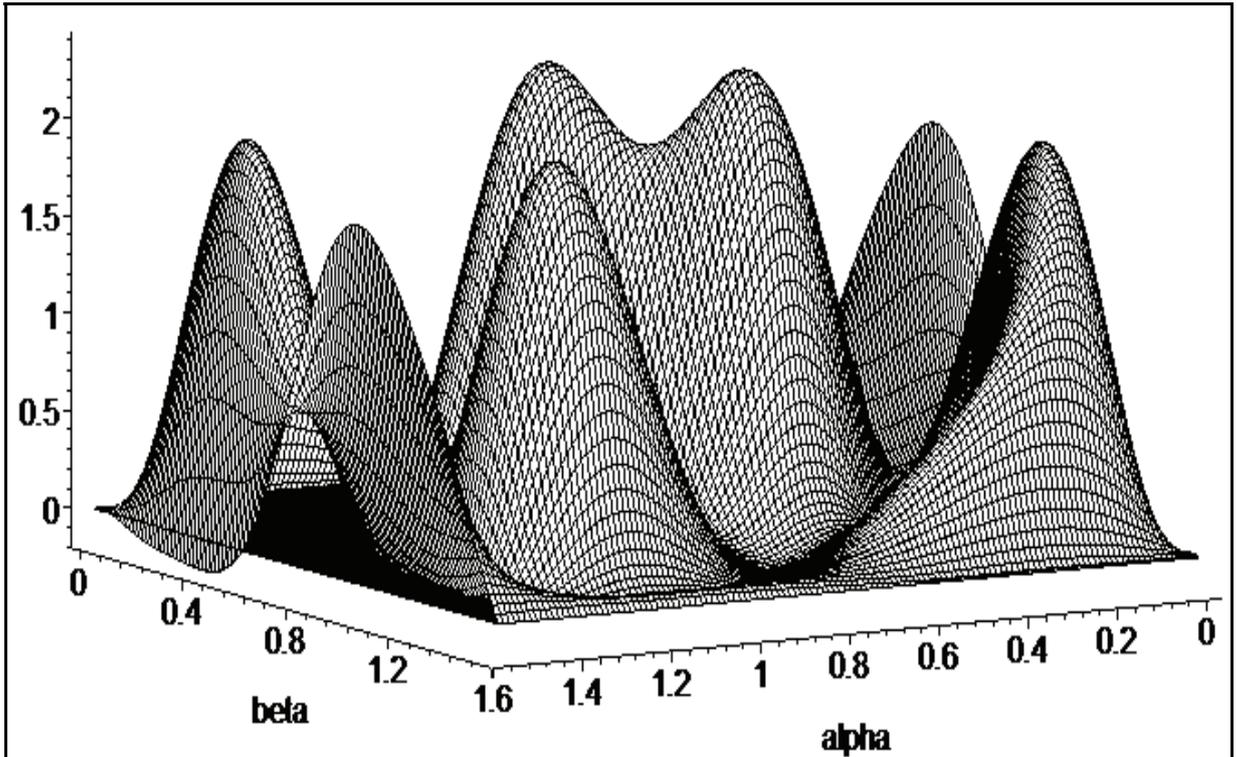


Рис. П1.12. Поверхность отклика обобщённой функции кнудсеновской индикатрисы рассеяния 8-го порядка, максимизированной (симплекс-метод) для скользящих углов " α " падения частиц. Реализуется детальный характер равновесия. Неотрицательность функции контролируется в 2048 точках внутренней области допустимых значений углов падения " α " и углов отражения " β " (LP_{τ} – метод)

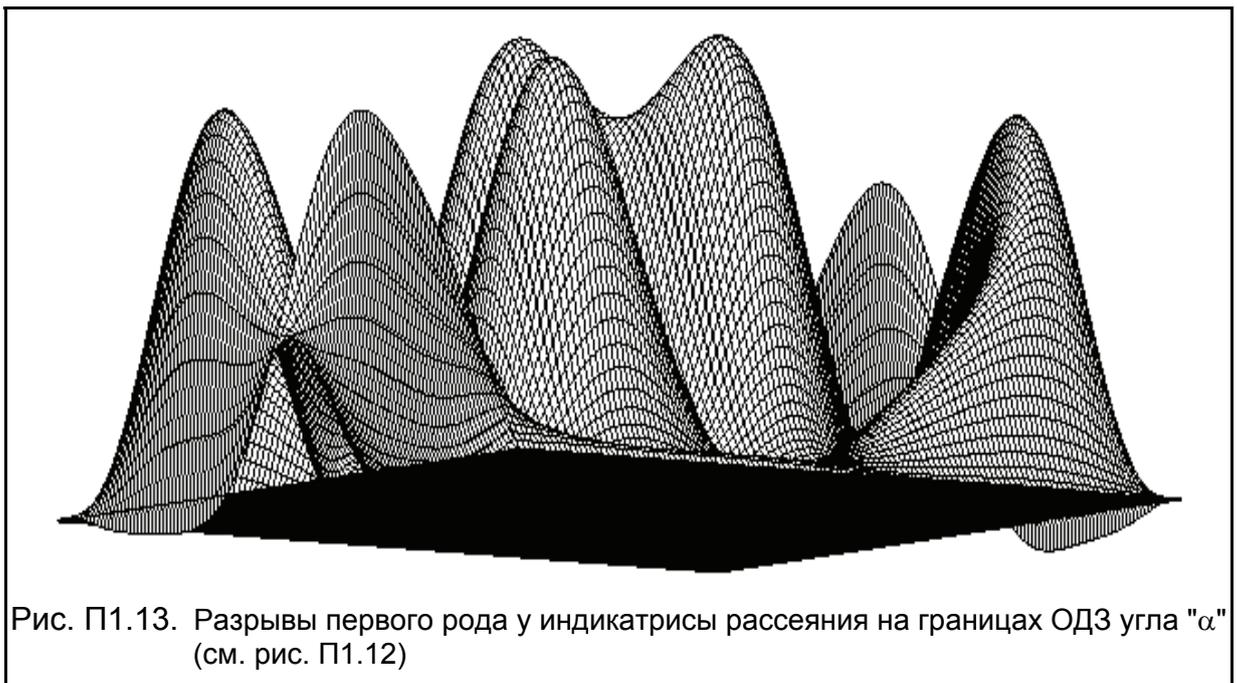


Рис. П1.13. Разрывы первого рода у индикатрисы рассеяния на границах ОДЗ угла " α " (см. рис. П1.12)

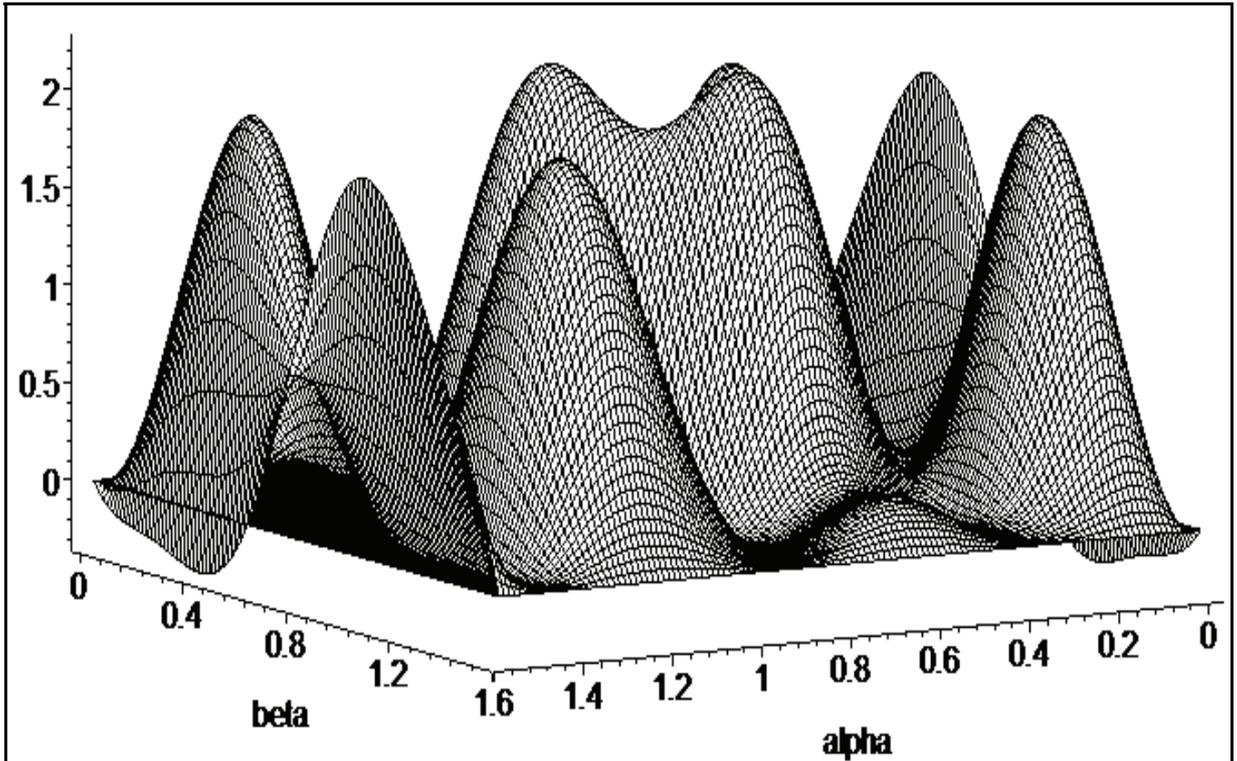


Рис. П1.14. Поверхность отклика обобщённой функции кнудсеновской индикатрисы рассеяния 8-го порядка, максимизированной (симплекс-метод) для скользящих углов " α " падения частиц. Реализуется глобальный характер равновесия. Неотрицательность функции контролируется в 1024 точках внутренней области допустимых значений углов падения " α " и углов отражения " β " (LP τ – метод)

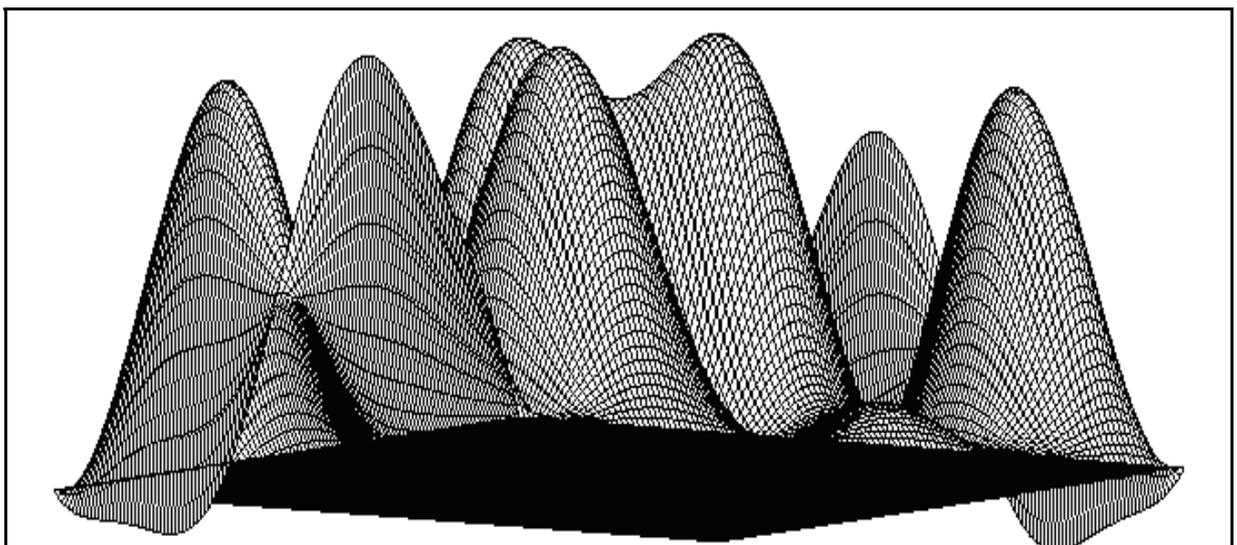


Рис. П1.15. Разрывы первого рода у индикатрисы рассеяния на границах ОДЗ угла " α " (см. рис. П1.14)

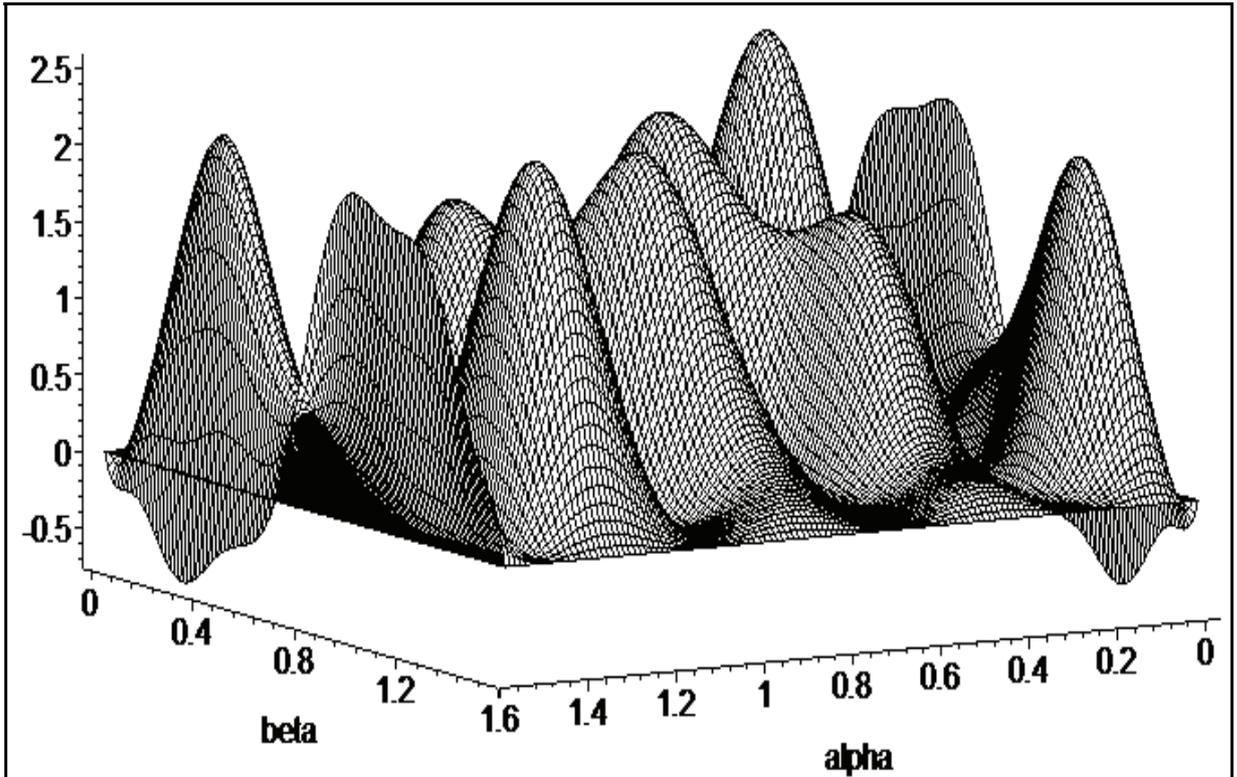


Рис. П1.16. Поверхность отклика для обобщённой функции кнудсеновской индикатрисы 10-го порядка, максимизированной (симплекс-метод) при скользящих углах " α " падения частиц. Реализуется глобальный характер равновесия. Неотрицательность функции контролируется в 1024 точках внутренней области допустимых значений углов падения " α " и углов отражения " β " (LP_{τ} – метод)

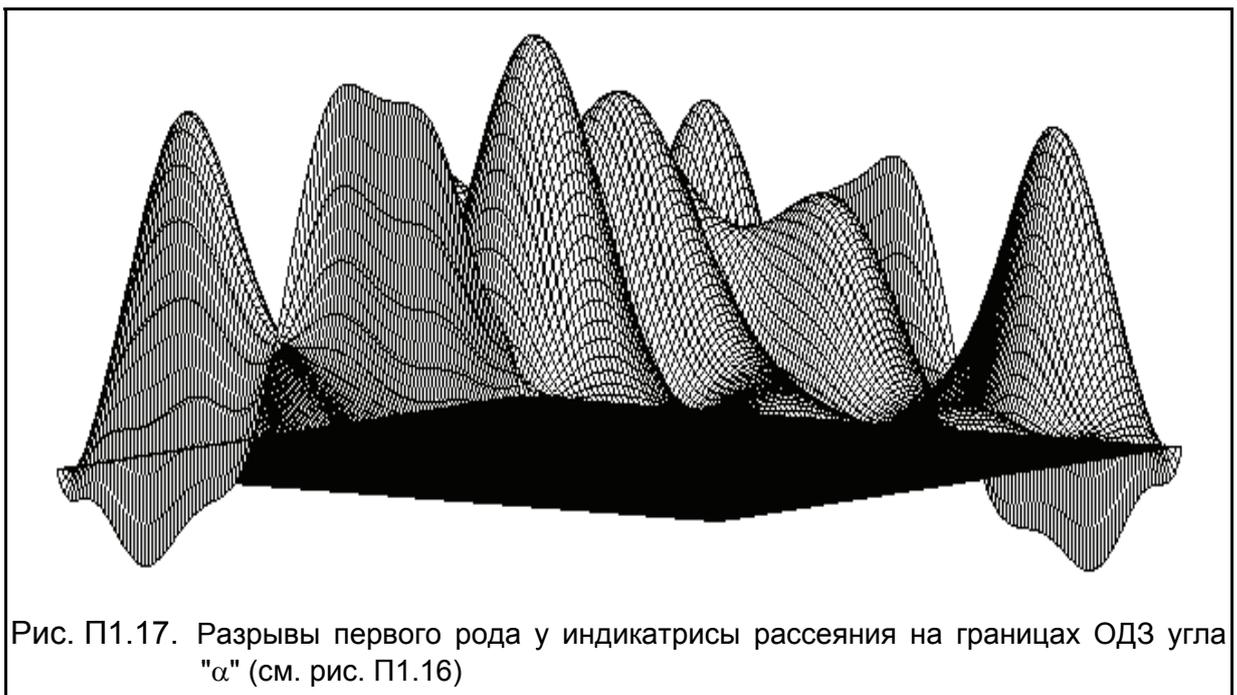


Рис. П1.17. Разрывы первого рода у индикатрисы рассеяния на границах ОДЗ угла " α " (см. рис. П1.16)

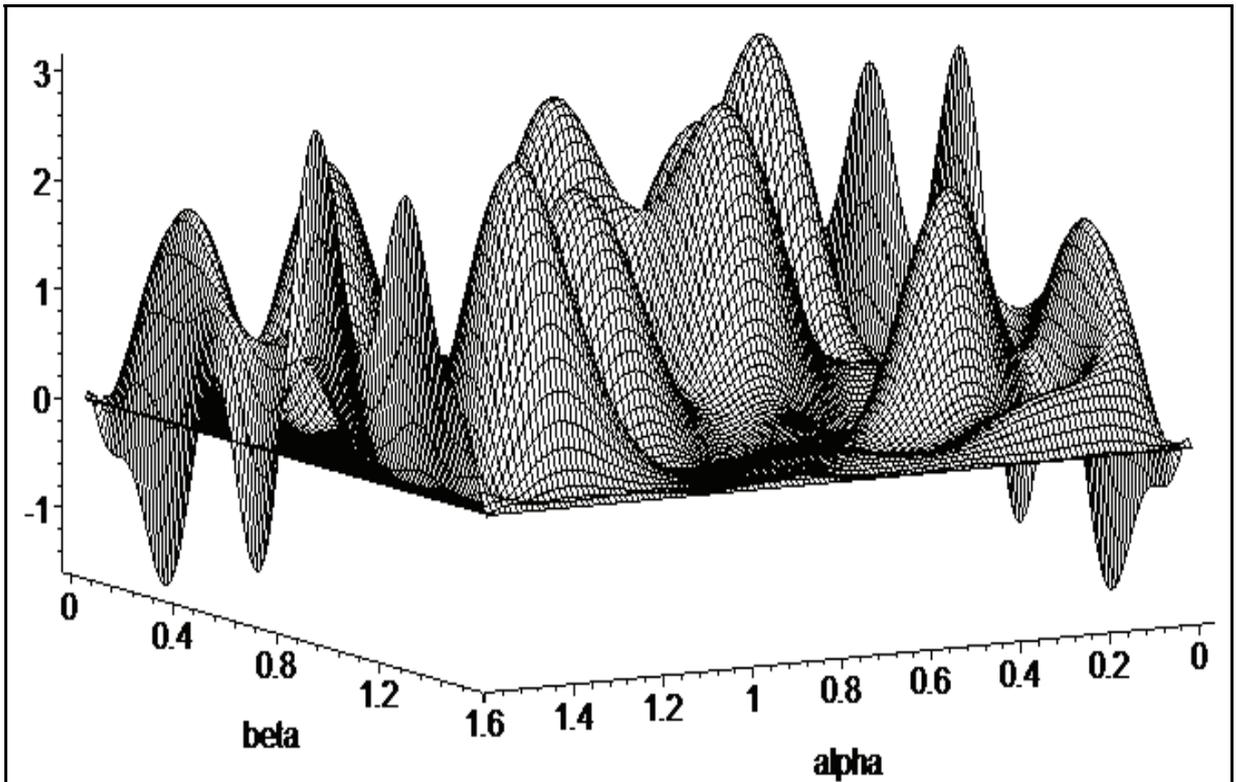


Рис. П1.18. Поверхность отклика для обобщённой функции кнудсеновской индикатрисы 12-го порядка, максимизированной (симплекс-метод) при скользящих углах " α " падения частиц. Реализуется детальный характер равновесия. Неотрицательность функции контролируется в 1024 точках внутренней области допустимых значений углов падения " α " и углов отражения " β " (LP τ – метод)

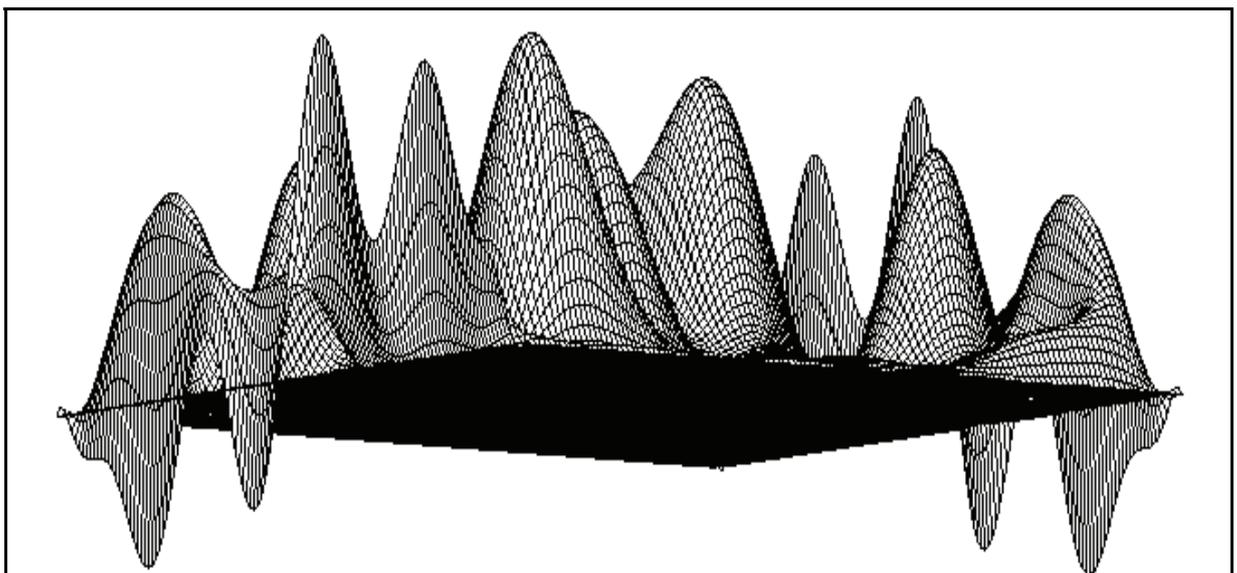


Рис. П1.19. Разрывы первого рода у индикатрисы рассеяния на границах ОДЗ угла " α " (см. рис. П1.18)

В заключение данной части¹ текущего приложения приведём конкретный пример того, почему здесь столь значительное внимание было уделено необходимости учёта возможных разрывов плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ на границах ОДЗ её аргументов.

Действительно, предполагая, например, непрерывность обобщённой функции $R(\alpha, \beta)$ в каждой точке области допустимых значений её аргументов " α " и " β " (включая и границы этих ОДЗ: $\alpha, \beta \in [0, \pi/2]$), можно было бы автоматически снять многие проблемы, связанные с последующим анализом свойств индикатрисы $g(\beta|\alpha)$.

Однако, следуя от противного, покажем, какие заведомо некорректные результаты будут получены, если игнорировать вероятность наличия вышеуказанных разрывов у индикатрисы рассеяния частиц. Для этого необходимо исследовать свойства довольно любопытной зависимости, которая существует между условным математическим ожиданием $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ угла отражения и его условной дисперсией $\mathbf{D}(\beta|\alpha)$.

Условная дисперсия $\mathbf{D}(\beta|\alpha)$ угла отражения по определению равна:

$$\mathbf{D}(\beta|\alpha) = \int_0^{\pi/2} [\beta - \mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta = \mathbf{M}(\beta^2|\alpha) - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 \quad (\text{П1.41})$$

Если учесть, что:
$$\mathbf{M}(\beta^2|\alpha) = \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta,$$

где
$$g(\beta|\alpha) = f(\beta) \cdot [R(\alpha, \beta) + 1],$$

То можно записать:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\beta|\alpha) &= \mathbf{M}(\beta^2|\alpha) - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 = \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 = \\ &= \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot f(\beta) \cdot d\beta + \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot f(\beta) \cdot R(\alpha, \beta) \cdot d\beta - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 = \\ &= \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} + \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot f(\beta) \cdot R(\alpha, \beta) \cdot d\beta - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2. \end{aligned}$$

Принимая во внимание нижеприведённое тождественное преобразование:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=4,6,\dots}^N \left[\int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = \\ &= \frac{\pi}{2} \cdot \left\{ \sum_{n=6,10,\dots}^N \left[\frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right] - \sum_{n=4,8,\dots}^N \left[\frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right] \right\}, \end{aligned}$$

а также:
$$\sum_{k=2,6,\dots}^K \left[\int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = \frac{\pi}{2} \cdot \left\{ \sum_{k=6,10,\dots}^K \left[\frac{\pi}{k^2 - 4} \right] - \frac{\pi}{16} \right\},$$

¹ Эта часть — "Численная проверка свойств формальной модели рассеяния".

Окончательно получаем:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}(\beta|\alpha) &= \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 + \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{a}_{j,k} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{k=2,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{b}_{m,k} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \cos(k \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{c}_{j,n} \cdot \cos(j \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] + \\
 &+ \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \sum_{n=4,6,\dots}^{\infty} \left[\mathbf{d}_{m,n} \cdot \sin(m \cdot \alpha) \cdot \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot \sin(2 \cdot \beta) \cdot \sin(n \cdot \beta) \cdot d\beta \right] = \\
 &= \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 + \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{a}_{j,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{a}_{j,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right] \right\} + \\
 &+ \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{b}_{m,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{b}_{m,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right] \right\} + \\
 &+ \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} + \\
 &+ \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} = \\
 &= \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} - [\mathbf{M}(\beta|\alpha)]^2 + \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left\{ \cos(j \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{a}_{j,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{a}_{j,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{c}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} + \\
 &+ \frac{\pi}{2} \cdot \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left\{ \sin(m \cdot \alpha) \cdot \left[\sum_{k=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{b}_{m,k} \cdot \frac{\pi}{k^2 - 4} \right) - \mathbf{b}_{m,2} \cdot \frac{\pi}{16} \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) - \sum_{n=4,8,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

(П1.42)

Проанализировав вид полученных формул (П1.38) и (П1.42), приходим к выводу, что между условным математическим ожиданием $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ угла отражения и его условной дисперсией $\mathbf{D}(\beta|\alpha)$ существует следующая зависимость:

$$\mathbf{D}(\beta|\alpha) = \mathbf{M}(\beta|\alpha) \cdot \left[\frac{\pi}{2} - \mathbf{M}(\beta|\alpha) \right] + \mathbf{S}(\beta|\alpha) - \frac{1}{2} \quad (\text{П1.43})$$

где значение условного (при заданной величине угла “ α ”) специального функционала $\mathbf{S}(\beta|\alpha)$ определяется формулой:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\beta|\alpha) &= \int_0^{\pi/2} \left(\beta - \frac{\pi}{4} \right)^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta + \frac{1}{2} - \frac{\pi^2}{16} = \int_0^{\pi/2} \beta^2 \cdot f(\beta) \cdot R_s(\alpha, \beta) \cdot d\beta = \\ &= \frac{\pi}{2} \cdot \left\{ \sum_{j=2,6,\dots}^{\infty} \left[\cos(j \cdot \alpha) \cdot \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{C}_{j,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=4,6,\dots}^{\infty} \left[\sin(m \cdot \alpha) \cdot \sum_{n=6,10,\dots}^{\infty} \left(\mathbf{d}_{m,n} \cdot \frac{8 \cdot n}{(n+2)^2 \cdot (n-2)^2} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{П1.44})$$

Соответственно, дисперсию рассеяния можно представить и в следующей форме:

$$\mathbf{D}(\beta|\alpha) = \underbrace{\left(\frac{\pi^2}{16} - \frac{1}{2} \right)}_{\text{Дисперсия диффузного рассеяния}} - \left[\mathbf{M}(\beta|\alpha) - \frac{\pi}{4} \right]^2 + \mathbf{S}(\beta|\alpha) = \int_0^{\pi/2} \left(\beta - \frac{\pi}{4} \right)^2 \cdot g(\beta|\alpha) \cdot d\beta - \left[\mathbf{M}(\beta|\alpha) - \frac{\pi}{4} \right]^2 \quad (\text{П1.45})$$

В случае справедливости свойства (П1.40) и при отсутствии разрывов у $R(\alpha, \beta)$, для $\alpha \rightarrow +0$ и $\alpha \rightarrow \pi/2$ должно иметь место равенство: $\mathbf{S}(\beta|\alpha = 0) = \mathbf{S}(\beta|\alpha = \pi/2) = 0$. Кроме того, при этом предполагается: $\mathbf{D}(\beta|\alpha = 0) = \mathbf{D}(\beta|\alpha = \pi/2) \geq 0$. Но, например, зависимость (П1.43), в сочетании с неотрицательностью значений дисперсии $\mathbf{D}(\beta|\alpha)$ и нулевой величиной $\mathbf{S}(\beta|\alpha)$, говорит о том, что разрешённые значения условного математического ожидания углов отражения $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ – принадлежат такому диапазону:

$$\frac{\pi}{4} - \frac{\sqrt{\pi^2 - 8 - 16 \cdot \mathbf{D}(\beta|\alpha)}}{4} \leq \mathbf{M}(\beta|\alpha) \leq \frac{\pi}{4} + \frac{\sqrt{\pi^2 - 8 - 16 \cdot \mathbf{D}(\beta|\alpha)}}{4}, \quad \mathbf{D}(\beta|\alpha) \geq 0. \quad (\text{П1.46})$$

Иначе говоря, ограничение вида (П1.46) гласит: частицы газа, падающие на отражающую поверхность под углами $\alpha \rightarrow +0$ или $\alpha \rightarrow \pi/2$, и рассеиваемые этой поверхностью, не при каких условиях не могут иметь «зеркальные» ($\mathbf{M}\beta \rightarrow \alpha$) математические ожидания углов отражения $\mathbf{M}\beta \rightarrow 0^\circ$ или $\mathbf{M}\beta \rightarrow 90^\circ$. Максимально допустимый диапазон для $\mathbf{M}(\beta|\alpha)$ таков: $25.4144^\circ \leq \mathbf{M}\beta \leq 64.5856^\circ$. Но результаты численного решения вариационной задачи вида (П1.36) этим ограничениям явно противоречат:

- Для индикатрисы, изображённой на рис. П1.12 и П1.13 (стр. 151), оптимизированное значение математического ожидания угла отражения составляет: $\mathbf{M}\beta \approx 63.1060^\circ$.
- Для индикатрисы, изображённой на рис. П1.14 и П1.15 (стр. 152), оптимизированное значение математического ожидания угла отражения составляет: $\mathbf{M}\beta \approx 67.0191^\circ$.
- Для индикатрисы, изображённой на рис. П1.16 и П1.17 (стр. 153), оптимизированное значение математического ожидания угла отражения составляет: $\mathbf{M}\beta \approx 74.1395^\circ$.
- Для индикатрисы, изображённой на рис. П1.18 и П1.19 (стр. 154), оптимизированное значение математического ожидания угла отражения составляет: $\mathbf{M}\beta \approx 79.1267^\circ$.

Очевидно, что преодоление ограничения (П1.46) становится возможным ввиду наличия у функции плотности вероятности $g(\beta|\alpha)$ разрывов первого рода при значениях углов $\alpha \rightarrow +0$ и $\alpha \rightarrow \pi/2$. Эти разрывы хорошо видны на рисунках П1.12-П1.19.

Выполнимость закона Кнудсена для диффузного газа квантовых частиц

В настоящем приложении были доказаны аналитически и проиллюстрированы численными методами особые свойства (П1.22) – (П1.27), означающие следующее:

Для любого математически корректного варианта описания кнудсеновского рассеяния частиц диффузного газа некоей поверхностью – обязано иметь место совпадение характеристик углового рассеяния частиц, задаваемых интегральными функционалами (П1.20) и (П1.21) и реализуемых для случаев предельно малых ($\alpha \rightarrow +0$) и предельно больших ($\alpha \rightarrow \pi/2$) значений углов падения частиц на указанную поверхность.

Вышеуказанное свойство физически реализуемо только для случаев либо строго зеркального, либо строго диффузного рассеяния частиц. Хотя формально таким свойством обладает, вообще-то, любой процесс рассеяния, индикатриса которого представлена *линейной* комбинацией зеркальной и диффузной компонент: см. формулу (4.1) на стр. 105, соответствующую кнудсеновскому случаю лишь при $\xi(\alpha, \lambda, R_z) = Const \in [0, 1]$.

Индикатрисы, которые имеют в своём описании зеркальную компоненту¹ неограниченной вариации вида: $g(\beta|\alpha) = \delta(\alpha - \beta)$, не являются здесь предметом рассмотрения, поскольку так называемая «дельта-функция Дирака» $\delta(\alpha - \beta)$ – не отвечает условиям Дирихле (эта обобщённая функция имеет разрыв второго рода при $\alpha = \beta$). Такая функция не может быть корректно представлена в рамках ряда Фурье-Шварца. Надо заметить, что описание индикатрис рассеяния частиц с помощью дельта-функции Дирака — нельзя признать вполне корректным не только с точки зрения физики². Дело в том, что аналитических (голоморфных) функций, обладающих свойствами дельта-функции, не бывает в принципе. Поэтому, даже сугубо абстрактные математические построения, в которых применяются импульсные функции, следует рассматривать как эвристические и нуждающиеся в строгих обоснованиях [25, стр. 792-793].

Диффузное рассеяние на стенке имеет место при $g(\beta|\alpha) = f(\beta) = \sin(2 \cdot \beta)$, т. е. при полностью отсутствующей зависимости между углами падения частиц "α" и углами их отражения "β": $R(\alpha, \beta) \equiv 0$ при $\forall \alpha, \beta \in [0, \pi/2)$. Такой тривиальный случай не представляет практического интереса. В настоящей работе рассматриваются процессы упругого дифракционного рассеяния квантовых частиц, когда вышеуказанная зависимость между углами падения и отражения имеется всегда, но, в отличие от ранее упоминавшегося варианта зеркального отражения, при описании которого используется импульсная дельта-функция Дирака, данная зависимость является стохастической (не детерминированной), а значит угловая дисперсия рассеяния — строго больше нуля.

Однако, как это уже неоднократно указывалось, для частиц квантового газа, обладающих волновыми свойствами, всегда должна иметь место зависимость вида (П1.47):

¹ Если такая компонента рассеяния является единственной, то речь идёт о строго зеркальном отражении частиц от поверхности. Зеркальное отражение предполагает детерминированный характер связи между чистым состоянием каждой частицы, падающей на конкретный участок данной поверхности, и состоянием этой частицы после акта рассеяния, что подразумевает нулевую дисперсию угла её отражения.

² Использование импульсной дельта-функции Дирака приводит к тому, что такая физическая характеристика, как, например, плотность вероятности, имеет во внутренних точках ОДЗ своих параметров (при равенстве углов "α" и "β") одновременно два разных значения, которые отличаются друг от друга на бесконечно большую величину.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (P(\alpha = \pi/2 - \varepsilon/2)_{bot}) \simeq 1 \quad (\text{П1.47})$$

Иначе говоря, характер упругого рассеяния квантовых частиц, который реализуется при их скользящем ($\alpha \rightarrow \pi/2$) падении на неровную поверхность, приближается к характеру зеркального отражения.

В то же время, очевидно, что для нормального (отвесного) падения квантовой частицы на поверхность, обладающую надлежащим микрорельефом, зеркальный характер отражения в общем случае не будет реализован¹:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (P(\alpha = \varepsilon/2)_{top}) \ll 1 \quad (\text{П1.48})$$

Из сказанного следует, что дифракционное рассеяние диффузного газа на отражающей поверхности — не может воспроизводить исходное кнудсеновское (ламбертовское) угловое распределение рассеиваемого потока². Для того, чтобы выяснить характер тех изменений, которые в данном случае будет претерпевать функция распределения, описывающая параметры газа в пристеночном пространстве, необходимы дополнительные условия уже не формально-математического, а физического характера.

Если в качестве вышеуказанных дополнительных условий будет использовано такое локальное следствие СРТ-теоремы, как принцип *T-инвариантности*, означающий симметрию вероятности осуществления физического процесса относительно инверсии знака времени³, то направленность изменения функции распределения — становится вполне очевидной. Результаты же наличия у любой кнудсеновской индикатрисы строго обязательных свойств (П1.22) – (П1.27), которые заведомо невозможно реализовать в некоторых определённых видах замкнутых физических систем, подробно рассматривались в подглавах "Вероятность индукции события квантового перехода" (стр. 25), "Выполнимость законов Кнудсена и Ламберта в квантовых системах" (стр. 41) и "Математический анализ физической корректности закона Кнудсена" (стр. 56).

Здесь только можно ещё раз подчеркнуть, что предлагаемые в настоящей работе уточнения аксиоматических принципов статистической физики являются следствием, как это было показано, иногда взаимоисключающего, а значит объективно необходимого выбора между двумя уже давно известными группами теоретических постулатов:

- **Первая группа:** Аксиоматические принципы статистической физики, сформированные на основе классических представлений середины девятнадцатого века.

¹ Совершенно не важно, в какой степени характер рассеяния при скользящем падении частиц на неровную поверхность соответствует свойствам именно зеркального отражения, т. е. насколько предел (П1.47) близок к единице. Здесь существенным является лишь то, что значения пределов (П1.47) и (П1.48) в общем случае не будут равны друг другу (не важно даже, какой из них будет больше, а какой меньше). Это различие пределов означает, что индикатриса рассеяния квантовых частиц на дифракционном экране — не принадлежит к числу тех формально допустимых «кнудсеновских» вариантов, для любого из которых обязательно выполнение условий (П1.22) и (П1.25).

² Такого рода воспроизведение исходного углового распределения — является совершенно необходимым с точки зрения второго закона термодинамики (см. стр. 101).

³ *T-инвариантность* нарушается лишь в процессах, заведомо не имеющих отношения к предмету настоящей работы, например, при слабых распадах K^0 , B^0 и D^0 - мезонов.

Эти принципы декларируют вероятность *статического* пребывания (обнаружения) замкнутой системы в каком-либо из доступных ей микросостояний.

- **Вторая группа:** СРТ-теорема, окончательно оформившаяся во второй половине двадцатого века. Данная теорема определяет вероятность *динамического* перехода физической системы в из одних доступных ей микросостояний — в другие.

Как это очевидно из содержания настоящей работы, в тех случаях, когда указанные группы постулатов вступают друг с другом в противоречие¹, предпочтение следует отдавать *СРТ-теореме Паули–Людерса* (разумеется, не потому, что она «более новая», а ввиду её объективно бóльшей адекватности свойствам реальных физических систем).



¹ Наличие таких противоречий, возможно, ранее игнорировалось по причине недооценки влияния граничных условий на состояние физических систем. Этот просчёт весьма характерен для исследуемой области. Р. Кубо, анализируя в [30, стр. 147-150] обоснованность аксиоматического принципа статистической физики о равновероятности доступных микросостояний, делает в своих рассуждениях типичную логическую погрешку: "Когда плотность частиц предполагается постоянной, а объём системы V и полное число частиц N стремятся к бесконечности [заметим, что речь всё же идёт о замкнутых системах – В. С.], то говорят о термодинамическом пределе. В этом пределе получаем сведения только об объёмных термодинамических свойствах системы и пренебрегаем влиянием на них поверхности. Конечно, вполне имеет физический смысл переход к пределу $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, основанный на расчётах при конечных N и V . Однако были попытки сформулировать статистическую механику сразу для бесконечных систем. Такой подход, известный под названием C^* -алгебры, начал развиваться лет десять назад. Автору, однако, неизвестно, как он связан с проблемой эргодичности".

Приложение П2: Физические эксперименты (фотометрия)

“ У Т В Е Р Ж Д А Ю ”

директор _____

 _____ / _____ /

31.07.2006

М. П.

“ У Т В Е Р Ж Д А Ю ”

Генеральный директор ГУП ВНЦ
 “Государственный оптический
 институт им. С. И. Вавилова”,

 _____ / _____ /

31.07.2006

М. П.

**Техническое задание № PE-L-A1 от 31.07.2006
 на создание научно-технической продукции.**

1. Предмет исследования.

- 1.1. Данная работа посвящена экспериментальному исследованию индикатрисы упругого волнового рассеяния¹ диффузного (см. пункт 1.2 ТЗ) светового излучения² на плоской макроповерхности³, обладающей определённым микрорельефом.
- 1.2. Под диффузным световым излучением в настоящей работе понимается неполяризованное некогерентное электромагнитное излучение, для отдельных фотонов которого с равной вероятностью реализуется любая возможная угловая ориентация в трёхмерном геометрическом пространстве их волновых **k** - векторов. По своим свойствам диффузное излучение близко к равновесному тепловому излучению в замкнутой полости (так называемому «чёрному излучению») с тем существенным отличием, что рассматриваемое здесь диффузное излучение может иметь, вообще говоря, произвольный спектральный состав.
- 1.3. Рассеивающая поверхность в данной работе представляет собой некоторую макроскопическую плоскость ($L \geq 10^4 \cdot \lambda$, где L – характерная линейная протяжённость поверхности, λ – типичная длина волны рассеиваемых фотонов), обладающую максимально высокой отражающей способностью по отношению к используемому световому излучению, т. е. соответствующий спектральный коэффициент отражения должен быть близок к единице (по крайней мере, желательно, чтобы данный коэффициент как можно меньше зависел от угла падения света на поверхность).

¹ То есть изоэнергетического рассеяния, определяемого законами квантовой механики.

² Здесь имеется в виду электромагнитное излучение, спектральный состав которого не обязательно принадлежит диапазону воспринимаемого человеческим глазом света.

³ Критерии допустимого отклонения формообразующей макроповерхности от идеальной плоскости — особо оговариваются между Заказчиком и Исполнителем.

Для обеспечения именно волнового характера рассеяния излучения поверхность должна обладать микрорельефом с определёнными характеристиками:

- Микрорельеф может иметь *хаотический* или особый *регулярный* характер, – в зависимости от выполняемого этапа настоящего Технического задания.
- В том случае, если микрорельеф имеет хаотический характер, то его свойства должны отвечать двум следующим требованиям:
 - а). Свойства микрорельефа должны быть одинаковы на всей площади отражающей поверхности и не могут зависеть от значений координат или от какого-либо конкретного азимутального направления на этой поверхности. Иначе говоря, микрорельеф поверхности должен обладать свойством однородности и изотропности, т. е. моделировать некую случайную шероховатость со среднеквадратичной высотой микронеровностей $\overline{R_z}$.
 - б). Высота отдельных микронеровностей должна быть стохастическим образом распределена по закону, гарантирующему соблюдение предыдущего пункта “а”. В частности, это, например, может быть нормальное распределение с заданным среднеквадратичным отклонением $\overline{R_z}$ от математического ожидания вертикальной координаты поверхности. Также необходимо, чтобы характер микрорельефа сводил к минимуму вероятность многократного отражения падающих на поверхность фотонов, т. е. микронеровности должны быть достаточно пологими. Указанное требование здесь выражено через ограничение скорости изменения высоты микронеровностей R_z на некотором участке поверхности, имеющем линейную протяжённость L :

$$\left| \frac{dR_z}{dL} \right| < 1.$$

- Если же микрорельеф имеет особый регулярный характер (он должен быть подобен одномерной дифракционной решётке с несимметричным профилем, – типа эшли Гаррисона или эшелетты Вуда), то конкретные свойства данного микрорельефа описываются в соответствующем пункте Технического задания.
- Для обеспечения именно волнового характера рассеяния фотонов параметры микрорельефа поверхности (в частности, среднеквадратичная высота её микронеровностей $\overline{R_z}$ – для случая хаотического профиля) особо согласуются в каждом конкретном случае со спектральным составом рассеиваемого излучения.

1.4. Конечным результатом проводимых исследований является получение индикатрисы рассеяния. Имеется в виду индикатриса для так называемой «удалённой зоны», т. е. для расстояний от отражающей поверхности, существенно больших по порядку величины, чем длина волны λ рассеиваемых фотонов. Таким образом, речь идёт об исследовании дифракции квантовых частиц, скорее в рамках модели Фраунгофера, чем модели Френеля. Индикатриса должна быть представлена в форме нормированной к единице плотности вероятности $g(\beta, \varphi)$, описанной как неотрицательная функция всех допустимых значений углов отражения $\beta \in [0, \pi/2)$ и углов азимута $\varphi \in [0, 2\pi)$ для траекторий рассеянных поверхностью частиц:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} g(\beta, \varphi) \cdot d\beta \cdot d\varphi = 1.$$

Очевидно, что в том случае, когда микрорельеф отражающей поверхности имеет изотропный хаотический характер, данная индикатриса практически будет являться функцией одного лишь угла отражения β . Например, при диффузном характере рассеяния, осуществляемом в соответствии с законом Ламберта¹, индикатриса рассеяния в любом произвольном (фиксированном) азимутальном направлении $\forall \varphi = Const \in [0, 2\pi)$ – описывается такой плотностью вероятности:

$$g(\beta, \varphi) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \cos(\beta)$$

При рассеянии же на поверхности с регулярной структурой микрорельефа (дифракционная решётка) индикатриса может зависеть как от угла отражения β , так и от угла азимута φ , т. е. размерность такой задачи увеличивается на единицу.

Если же использовать понятия, более привычные для фотометрии, чем плотность вероятности, то надо отметить, что параметры вышеописанной индикатрисы рассеяния могут быть однозначно определены через характеристику яркости освещённой поверхности, наблюдаемой под углом отражения β и углом азимута φ .

2. Цель настоящей работы.

- 2.1. В ходе осуществления поискового проекта “Euler”, в рамках которого выполняется работа по данному Договору, Автором проекта было впервые высказано следующее предположение: возможно существование замкнутых физических систем, наиболее вероятные стационарные макроскопические состояния которых не являются термодинамически равновесными в том смысле, что для них не будет выполняться главная аксиоматическая гипотеза статистической физики о равновероятности всех образующих их микросостояний.

На основании результатов ряда теоретических и экспериментальных исследований Автора установлено, что вышеуказанные стационарные макросостояния должны быть характерны для некоторых видов квантовых систем в таких предметных областях, как твёрдотельная электроника, квантовая оптика и молекулярная динамика, когда имеет место упругое волновое рассеяние (дифракция) газа квантовых частиц (электронов проводимости, фотонов электромагнитного излучения или молекул газа) на границах заполняемого ими объёма.

- 2.2. Целью работы по данному Договору является прямая экспериментальная проверка упомянутых в пункте 2.1 выводов Автора, а именно: предполагается, что упругое волновое рассеяние изотропного газа фотонов электромагнитного излучения на некоторой поверхности должно порождать отражённый от этой поверхности световой поток, характеристики которого не будут изотропными, т. е. такое дифракционное отражение будет осуществляться с нарушением закона Ламберта.

При этом следует особо обратить внимание на следующее обстоятельство: если рассеиванию подвергается фотонный газ с изначально не изотропными свойствами (например, все частицы падают на отражающую поверхность под одним и тем же углом), то для такой ситуации отклонение от закона Ламберта встречается ча-

¹ Для частиц с ненулевой массой покоя (например, в молекулярной динамике) функциональным аналогом закона Ламберта является закон Кнудсена.

ще, чем его наблюдение, – это общеизвестный факт, который сам по себе ещё не означает нарушения гипотезы о равновероятности всех доступных микросостояний. В качестве примера можно рассмотреть случай зеркального отражения. Не изотропный световой поток, падающий на поверхность под некоторым определённым углом, не подвергается какому-либо рассеянию вообще и рассеянию по закону Ламберта в частности: параметры отражённого потока строго детерминированы и определяются параметрами падающего потока. Однако если зеркальному отражению подвергается световой поток *диффузного* излучения, то суммарный отражённый поток будет также диффузным, что исключает какие-либо отклонения от закона Ламберта. Поэтому реальный интерес с точки зрения проверки высказанного в пункте 2.1 предположения представляет анализ интегральной индикатрисы волнового рассеяния именно изотропного диффузного излучения.

3. Технические требования.

3.1. Требования к источнику электромагнитного излучения.

3.1.1. В качестве источника электромагнитного излучения необходимо выбрать лазер, работающий в коротковолновой области инфракрасного спектра (так называемое «ближкое ИК излучение»): $\lambda \approx 0.80 \div 1.50 \text{ мкм}$. Оптимальная длина волны составляет: $\lambda \approx 1.0 \text{ мкм}$.

Вместо лазера допустимо использование и другого источника, обладающего достаточно узким спектральным составом излучения в вышеуказанном диапазоне длин волн. Например, это может быть цезиевая дуговая лампа с двумя сильно выраженными полосами $\lambda \approx 0.85 \text{ мкм}$ и $\lambda \approx 0.89 \text{ мкм}$ или гелиевая газоразрядная трубка Гейслера с яркими линиями $\lambda \approx 1.08 \text{ мкм}$ и $\lambda \approx 2.06 \text{ мкм}$. Выделение излучения с необходимой длиной волны осуществляется в этом случае с помощью соответствующего набора фильтров, помещаемых перед ИК приёмником (для уменьшения тепловой нагрузки на фильтр).

Выбор спектрального состава используемого излучения является в данном случае компромиссным:

- с одной стороны необходимо минимизировать трудоёмкость проводимых в настоящей работе фотометрических измерений (необходимую разрешающую способность аппаратуры легче обеспечить при малой длине волны);
- с другой стороны по ряду важных причин весьма желательно, чтобы коэффициент отражения используемого излучения от исследуемых поверхностей имел максимально возможное и стабильное значение (спектральный коэффициент отражения, как правило, возрастает с увеличением длины волны).

3.1.2. Рассеиватель электромагнитного излучения должен обеспечивать диффузное неполяризованное некогерентное освещение образцов исследуемых поверхностей. В частности, яркость данного освещения (поверхностная плотность силы света) должна быть одинакова для всех возможных угловых направлений движения падающих на исследуемую поверхность фотонов (см. пункт 1.2 ТЗ). Это требование относится как к углам падения фотонов, так и ко всем азимутальным направлениям, с которых эти фотоны приходят на освещаемую поверхность.

В качестве указанного рассеивателя излучения может, например, использоваться фотометрический шар. Внутренняя поверхность такого шара должна быть покрыта материалом, обеспечивающим эффективное диффузное рассеивание вводимого в него излучения при одновременно высоком значении спектрального коэффициента отражения для этого излучения. Одним из лучших материалов такого рода является сульфат бария (BaSO_4) со спектральным коэффициентом диффузного отражения для $\lambda \approx 0.80 \div 1.00 \text{ мкм} - \rho_\lambda \approx 0.990 \div 0.992$.

Предполагается, что исследуемый образец поверхности, помещённый в описанный фотометрический шар, будет освещён в соответствии с вышеуказанными требованиями. Относительное отклонение угловых яркостных характеристик падающего на образец света не должно превышать 1% от значений, соответствующих случаю идеального диффузного освещения (см. пункт 4.1.2 ТЗ).

- 3.1.3. Требования к источнику электромагнитного излучения могут быть скорректированы в процессе работы по согласованию с Заказчиком.

3.2. Требования к образцам рассеивающих поверхностей.

- 3.2.1. Образцы рассеивающих поверхностей изготавливаются на основе плоских пластин, материал которых (медь, стекло) технологически позволяет сформировать на них микрорельеф с нужными параметрами. Далее эти пластины покрываются тонкой (для сохранения геометрических характеристик микрорельефа) плёнкой металла, устойчивого к воздействию окружающей среды (окисление) и имеющего высокое и стабильное значение коэффициента спектрального отражения для используемого диапазона электромагнитных излучений. Такими свойствами обладает золото, которое широко применяется для создания отражающего слоя на поверхности дифракционных решёток ($Au: \lambda \approx 1 \div 100 \text{ мкм} - \rho_\lambda \approx 0.97 \div 0.98$). Следует особо заметить, что цели настоящей работы полностью исключают возможность нанесения каких-либо защитных диэлектрических покрытий на отражающие поверхности образцов. Если такое покрытие, например плёнка двуокиси кремния, будет всё же нанесена на образец, то часть излучения, рассеиваемого этим образцом под большими углами, окажется «запертой» внутри защитной плёнки вследствие «явления полного внутреннего отражения». В результате вид исследуемой индикатрисы рассеяния будет недопустимо искажён. Следовательно, металлическое покрытие поверхностей образцов должно *одновременно* обладать как высокой отражающей способностью для используемого вида электромагнитного излучения, так и химической устойчивостью к длительному воздействию окружающей среды. Это сочетание требований объективно обуславливает выбор именно золота (а не, например, серебра, алюминия, палладия или никеля) в качестве материала для отражающего покрытия поверхностей образцов.

Геометрическая форма в плане и конкретные размеры образцов (для всех образцов эти параметры должны быть одинаковы) выбираются Исполнителем самостоятельно на основе необходимости достижения формулируемых в настоящем ТЗ целей, а также исходя из имеющихся технологических возможностей.

- 3.2.2. Поверхность каждого образца, изготовленного на одной пластине, по своим свойствам должна быть, условно говоря, «зеркальной» (образец № 1) или «дифракционной» (образцы № 2, 3, 4, 5, 6 и 7).

Образец № 1 должен иметь «зеркальную» (полированную) поверхность со столь малым по своему масштабу микрорельефом, который обеспечит минимальную угловую дисперсию отражаемого излучения с используемой в настоящей работе длиной волны (см. пункт 3.1.1 ТЗ). В частности, при нормальном (отвесном) падении на такой образец плоскопараллельного пучка данного излучения – угловая дисперсия отражённого луча не может превышать четверти градуса (0.25°).

«Дифракционные» образцы поверхностей должны иметь микрорельеф *хаотического* (№ 2, 3, 4, 5 и 6) или *регулярного* (№ 7) характера (см. пункт 1.3 ТЗ).

- 3.2.3. Общие свойства образцов «дифракционного» типа с хаотическим микрорельефом поверхности описаны в пункте 1.3 Технического задания. Конкретные значения среднеквадратичной высоты микронеровностей, выраженные через длину волны рассеиваемого излучения λ , выглядят следующим образом:

$$\overline{R_z(\lambda, X)} = \frac{\sqrt{2}}{8} \cdot \lambda \cdot X \approx 0.1768 \cdot \lambda \cdot X \pm 10\%$$

- Для образца № 2: $X = 1$;
- Для образца № 3: $X = 2$;
- Для образца № 4: $X = 1/2$;
- Для образца № 5: $X = 4$;
- Для образца № 6: $X = 1/4$.

Скорость изменения высоты микронеровностей R_z на любом участке поверхности, имеющем линейную протяжённость L , должна отвечать ограничению:

$$\left| \frac{dR_z}{dL} \right| < 1.$$

- 3.2.4. Общие свойства образца № 7 с регулярным микрорельефом поверхности описаны в пунктах 1.3 и 4.3.2 Технического задания. Уточнение параметров соответствующей одномерной дифракционной решётки с несимметричным профилем (типа эшли Гаррисона или эшелетты Вуда) может быть осуществлено **Заказчиком** по согласованию с **Исполнителем** на основании результатов выполнения первого этапа настоящего Договора, а также исходя из имеющихся технологических возможностей.

- 3.2.5. Требования к образцам рассеивающих поверхностей могут быть скорректированы в процессе работы по согласованию с **Заказчиком**.

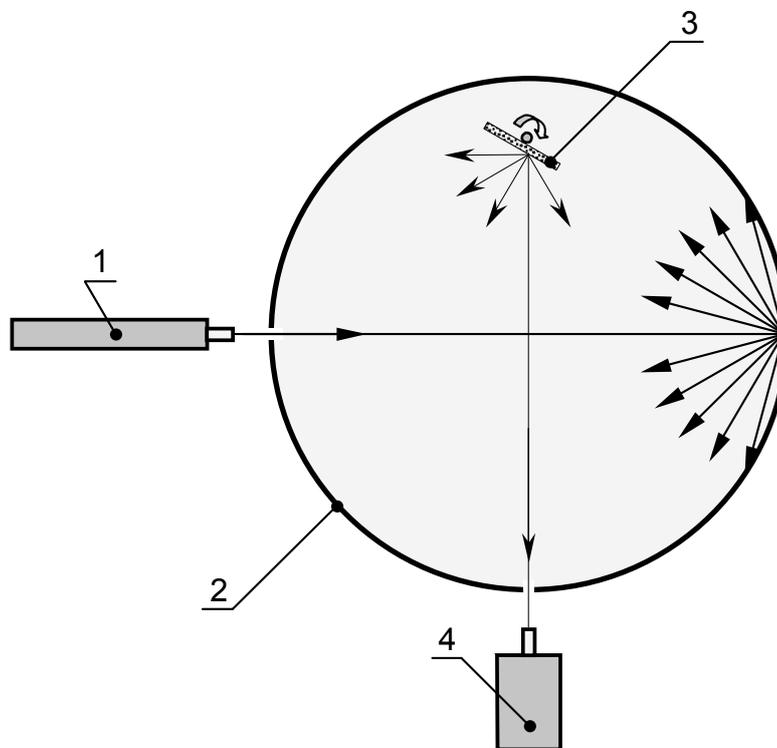
3.3. Требования к измерительной аппаратуре.

- 3.3.1. Характеристики аппаратуры, используемой при выполнении работ по данному Договору (для фотометрических измерений, для исследования микрорельефа поверхности образцов и т. д.), должны соответствовать всем тем требованиям настоящего Технического задания, надлежащая реализация которых зависит от свойств указанной аппаратуры и методологии её применения.

Исполнитель самостоятельно определяет необходимые конкретные параметры измерительной аппаратуры исходя из вышеуказанных требований.

3.4. Описание возможного варианта экспериментальной установки.

3.4.1. Далее приведена схема предполагаемого варианта¹ экспериментальной установки, предназначенной для осуществления работ по настоящему Договору.



Элементы экспериментальной установки

1. Источник монохромного ИК излучения – лазер с длиной волны $\lambda \approx 1.0 \text{ мкм}$.
2. Фотометрический шар, внутренняя поверхность которого покрыта слоем вещества, диффузно рассеивающего лазерное ИК излучение (сульфат бария BaSO_4).
3. Образец исследуемой поверхности. Для варьирования угла отражения, под которым выполняется оценка яркости этой поверхности, данный образец имеет возможность поворачиваться вокруг соответствующей оси.
4. Приёмник ИК излучения, используемый для получения относительной оценки яркости исследуемой поверхности в зависимости от угла, под которым данная поверхность наблюдается.



¹ Данный вариант схемы экспериментальной установки предложен одним из научных консультантов проекта — Ивановым А. Ю.

4. Содержание и объём выполняемых экспериментов.

4.1. Первый этап выполняемых экспериментов заключается в следующем:

4.1.1. В соответствии с ранее заявленной целью настоящей работы осуществляется проверка принципиального наличия или отсутствия (на качественном уровне) каких-либо существенных отклонений от закона Ламберта при волновом рассеянии изотропного газа фотонов отражающей поверхностью.

Указанная цель достигается в ходе получения нормированной к единице индикатрисы рассеяния (см. пункт 1.4 ТЗ) монохромного диффузного излучения на «дифракционном» образце № 2 (см. пункт 3.2.3 ТЗ), обладающем хаотическим микрорельефом с разбросом высоты неровностей $\overline{R_z}$:

$$\overline{R_z}(\lambda) = \frac{\sqrt{2}}{8} \cdot \lambda \approx 0.1768 \cdot \lambda \pm 10\%$$

Отклонения от монохромности светового источника с длиной волны λ и отклонения от заданной среднеквадратичной высоты микрорельефа $\overline{R_z}$ — допускаются в пределах обозначенной погрешности ($\pm 10\%$), но с обязательным соблюдением требований пространственной однородности и изотропности данных параметров (см. пункты 1.2 и 1.3 ТЗ). Кроме того, скорость изменения высоты микронеровностей R_z на любом участке поверхности, имеющем линейную протяжённость L , должна отвечать ограничению:

$$\left| \frac{dR_z}{dL} \right| < 1.$$

Очевидно, что в рассматриваемом случае индикатриса рассеяния может быть описана как функция только одного аргумента — угла отражения частиц.

4.1.2. Выполнение данного этапа экспериментальных работ должно состоять из следующих обязательных трёх шагов:

- Проверка реальных характеристик микропрофиля поверхности «зеркального» образца № 1 и «дифракционного» образца № 2. Форма данной проверки выбирается Исполнителем самостоятельно, исходя из необходимости достижения тех целей, которые поставлены в настоящем Техническом задании. В частности, результаты исследования поверхностей образцов должны содержать информацию о среднеквадратичной высоте микронеровностей $\overline{R_z}$ той или иной поверхности, а также доказательства пространственной однородности распределения указанных микронеровностей (см. пункт 1.3 ТЗ). Кроме того, для «дифракционного» образца № 2 необходимо также осуществить проверку выполнения условия достаточной пологости микронеровностей:

$$\left| \frac{dR_z}{dL} \right| < 1.$$

- Проверка характеристик исходного светового поля на предмет соблюдения заявленных в настоящем Техническом задании требований (см. пункт 3.1.2). В частности, рассеиватель электромагнитного излучения (например, фотометри-

ческий шар) должен обеспечивать диффузное неполяризованное некогерентное освещение исследуемых образцов поверхностей. Для выполнения указанной проверки необходимо сравнить две индикатрисы: *зеркальную* индикатрису, получаемую при рассеянии имеющегося светового потока на поверхности «зеркального» образца № 1, и теоретически определённую *диффузную* индикатрису, соответствующую отражению строго по закону Ламберта некоторого идеально диффузного излучения. Относительное расхождение зеркальной и диффузной индикатрис не должно превышать 0.1% для любых возможных значений угла отражения: $\forall \beta \in [0, \pi/2)$. Шаг углов отражения, для которых будут измеряться параметры зеркальной индикатрисы, не должен превышать 1° . Если же динамика изменения данной индикатрисы в каком-либо ограниченном диапазоне углов отражения будет такова, что шаг в 1° очевидно сможет привести к существенной потере информации, то для указанного диапазона углов отражения величина шага должна быть уменьшена до необходимого уровня.

- Снятие индикатрисы рассеяния диффузного светового поля для поверхности с хаотическим микрорельефом («дифракционный» образец № 2). Относительная погрешность регистрируемых значений плотности вероятности этой *дифракционной* индикатрисы не должна превышать 0.1% для любых возможных значений угла отражения: $\forall \beta \in [0, \pi/2)$. Шаг углов отражения, для которых будут измеряться параметры дифракционной индикатрисы, не должен превышать 1° . Если же динамика изменения данной индикатрисы в каком-либо ограниченном диапазоне углов отражения будет такова, что шаг в 1° очевидно сможет привести к существенной потере информации, то для указанного диапазона углов отражения величина шага должна быть уменьшена до необходимого уровня.

4.1.3. Методика получения зеркальной и дифракционной индикатрис рассеяния обязана принципиально исключать какое-либо существенное влияние на результат неизбежного наличия некоторых (пусть и весьма небольших) локальных особенностей микропрофиля рассеивающей поверхности и отклонений от азимутальной изотропности исходного светового потока. Это предполагает выполнение определённых процедур усреднения снимаемых показаний применительно к диапазонам варьирования соответствующих пространственных координат и азимутальных направлений.

4.1.4. Содержание пункта 4.1 настоящего Технического задания может быть скорректировано в процессе работы по согласованию с Заказчиком.

4.2. Второй этап выполняемых экспериментов заключается в следующем:

4.2.1. Решение о реализации данного пункта 4.2 настоящего Технического задания принимается Заказчиком на основании информации, предоставленной ему Исполнителем по результатам выполнения пункта 4.1 ТЗ.

4.2.2. В ходе выполнения данного этапа 4.2 ТЗ — для образцов № 3, 4, 5 и 6 (именно в таком порядке) должны быть осуществлены те же работы, которые ранее проводились в отношении образца № 2 (см. пункт 4.1 ТЗ). Однако отметим, что при этом не требуется повторять какие-либо действия по проверке надлежащих характеристик исходного светового поля (работа с «зеркальным» образцом № 1).

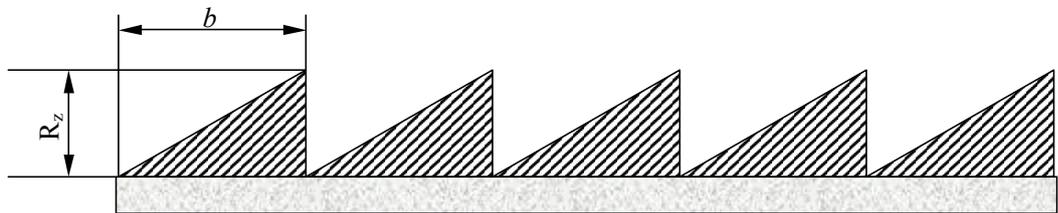
4.2.3. Содержание пункта 4.2 настоящего Технического задания может быть скорректировано в процессе работы по согласованию с Заказчиком.

4.3. Третий этап выполняемых экспериментов заключается в следующем:

4.3.1. Решение о реализации данного пункта 4.3 настоящего Технического задания принимается Заказчиком на основании информации, предоставленной ему Исполнителем по результатам выполнения пункта 4.1 ТЗ.

4.3.2. В ходе выполнения данного этапа 4.3 ТЗ — для образца № 7 должны быть осуществлены те же работы, которые ранее проводились в отношении образцов № 3, 4, 5 и 6 (см. пункт 4.2 ТЗ). Уточнённые решения, связанные с выбором профиля эшелетты, азимутальных параметров регистрируемых индикатрис рассеяния и т. п. — могут быть приняты на основании информации о результатах выполнения пункта 4.1 ТЗ.

Пока предварительно считается, что регулярный микрорельеф, образующий одномерную дифракционную решётку на поверхности образца № 7, имеет несимметричный «пилообразный» профиль, характерный для эшелетты Вуда или эшели Гаррисона. Угол наклона штрихов к макроскопической поверхности решётки должен составлять: $\approx \pi/8 \text{ rad} \approx 22.5^\circ$. Полная высота профиля решётки принимается равной: $R_z \approx (2 - \sqrt{2}) \cdot \lambda \approx 0.5858 \cdot \lambda$. Соответственно, ширина одного элемента профиля будет равна: $b \approx \sqrt{2} \cdot \lambda \approx 1.4142 \cdot \lambda$:



(визуальные пропорции между величинами R_z и b на рисунке — условны)

Вполне вероятно, что рассеивающие свойства образца № 7 не являются одинаковыми вдоль различных азимутальных направлений ввиду анизотропного характера микрорельефа его поверхности. Поэтому предполагается, что на данном этапе работ исследуемая индикатриса для указанного образца может зависеть не только от всех допустимых значений угла отражения $\beta \in [0, \pi/2)$, но также и от значений угла азимута $\varphi \in [0, 2\pi)$. По указанной причине получение полной индикатрисы рассеяния должно проводиться с одновременным варьированием, как углов отражения, так и углов азимута.

В настоящий момент предварительно намечено, что шаг углов отражения β , для которых должны измеряться параметры дифракционной индикатрисы образца № 7, равен приблизительно $\approx 3^\circ$, а шаг углов азимута φ — около $\approx 15^\circ$. Если же динамика изменения данной индикатрисы в каком-либо ограниченном диапазоне углов отражения или азимута будет такова, что указанные значения шагов смогут привести к существенной потере информации, то величины соответствующих угловых шагов должны быть уменьшены до необходимого уровня.

4.3.3. Содержание пункта 4.3 настоящего Технического задания может быть скорректировано в процессе работы по согласованию с Заказчиком.

5. Порядок приёмки результатов работы.

- 5.1. По итогам выполнения настоящей работы должен быть составлен отчёт, содержащий полную информацию об условиях проведения экспериментов и о соответствующих результатах. Отчёт предоставляется Заказчику в форме «твёрдых копий», отпечатанных на бумажных листах размера А4 (3 экземпляра), а также в виде компьютерных файлов, подготовленных в редакторе «Microsoft Word Office 2003» (по согласованию с Заказчиком возможно использование иных инструментальных программных средств, способных создавать совместимые с вышеуказанным текстовым редактором файлы).
- 5.2. В ходе работ Исполнитель обязан предоставлять запрашиваемую Заказчиком информацию о текущих результатах выполнения Технического задания. Указанная информация может иметь произвольную форму, устраивающую обе стороны.

Научный руководитель работы
со стороны Заказчика:

Автор проекта “Euler”

_____ / В. В. Савуков /

Научный руководитель работы
со стороны Исполнителя:

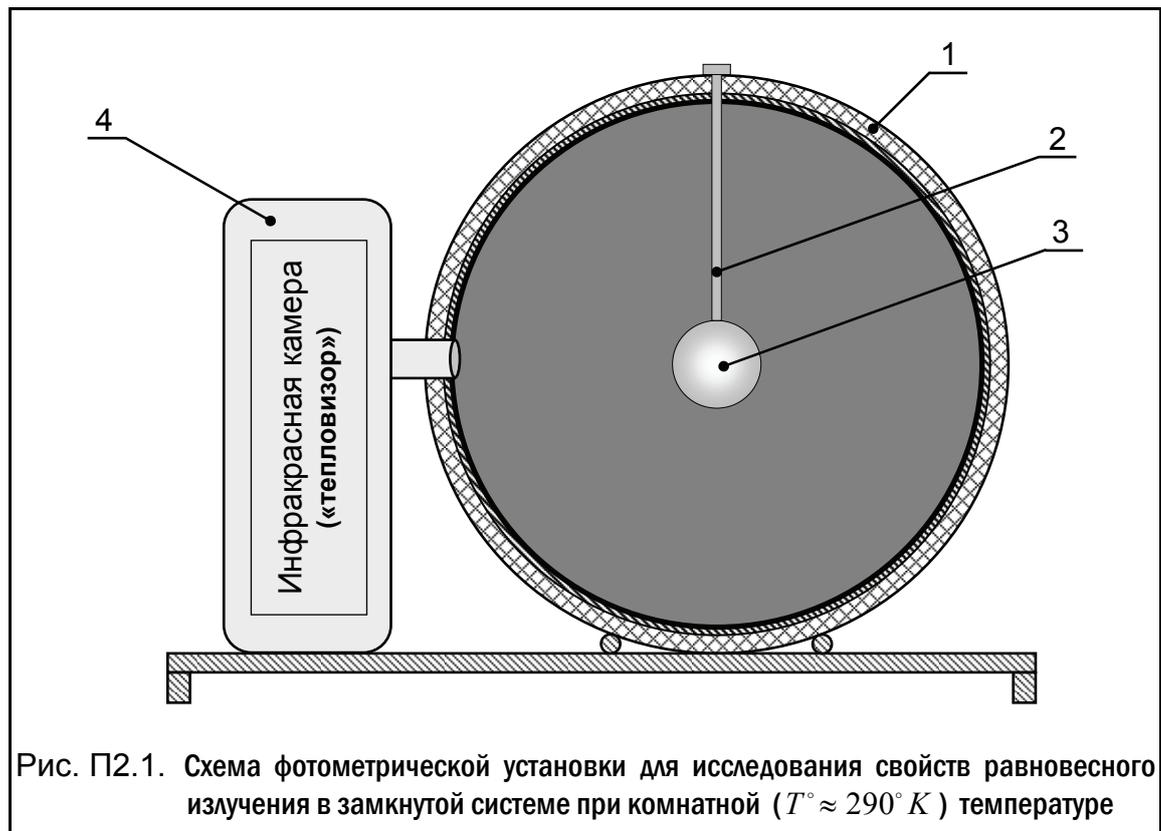
.....

_____ / /

Другие варианты реализации фотометрических исследований

Вышеописанное техническое задание по проведению фотометрических исследований — вполне отвечает целям проверки тех теоретических выводов, которые были получены в настоящем проекте. Тем не менее, ожидаемые в ходе эксперимента результаты могут быть не вполне понятны для людей, плохо знакомых с фотометрией и её термодинамическими условиями [35, стр. 63], выраженными через закон Ламберта.

Поэтому здесь решено описать ещё один вариант реализации физического эксперимента, который отличался бы простотой осуществления и наглядностью получаемых результатов. На рис. П2.1 дана схема установки для проведения такого эксперимента.



Элементы экспериментальной установки

1. Корпус термостатированной полости (изолированная физическая система), внутри которой созданы условия для стационарного макросостояния теплового равновесия.
2. Жёсткий подвес, удерживающий шар 3 в центре полости 1.
3. Шар, поверхность которого может иметь заданные характеристики отражения, рассеяния или поглощения (испускания) теплового (ИК) излучения внутри полости 1.
4. Длинноволновая ($\lambda \approx 8 \div 12 \text{ мкм}$) лабораторная инфракрасная камера («тепловизор») с разрешением не ниже $\approx 0.02^\circ K$, например, камера Барнса (см. [46, стр. 240-242]). Предназначена для получения высокоточных снимков «теплового портрета» шара 3 на фоне излучения внутренней поверхности полости 1, пребывающей в наиболее вероятном для данных условий состоянии теплового равновесия.

- Корпус термостатированной полости 1 (замкнутая система) состоит из двух слоёв:
 - Внешний слой, играющий роль термоизоляции. Он замедляет проникновение во внутреннее пространство полости 1 наружных тепловых потоков, обусловленных воздействием на установку соответствующих факторов внешней среды.
 - Внутренняя металлическая оболочка. Её роль состоит в равномерном перераспределении по всей внутренней поверхности полости 1 тех внешних тепловых потоков, которые проникают в полость через термоизоляцию. Это необходимо сделать ввиду возможного наличия в помещении лаборатории пространственно неоднородных тепловых потоков (сквозняки, неравномерное солнечное освещение и т. п.). Для увеличения коэффициента поглощения (излучения) той стороны поверхности металлической оболочки, которая обращена внутрь рабочей полости 1, данная поверхность должна иметь соответствующее чёрное покрытие (сажа и др., – см. [46, стр. 26]).

Следует заметить, что корпус 1, как и сама внутренняя полость, могут иметь произвольную геометрическую форму (совершенно не обязательно именно сферическую). Если это более удобно по технологическим соображениям, то корпус 1 может быть выполнен, например, в форме прямоугольного ящика (параллелепипеда).

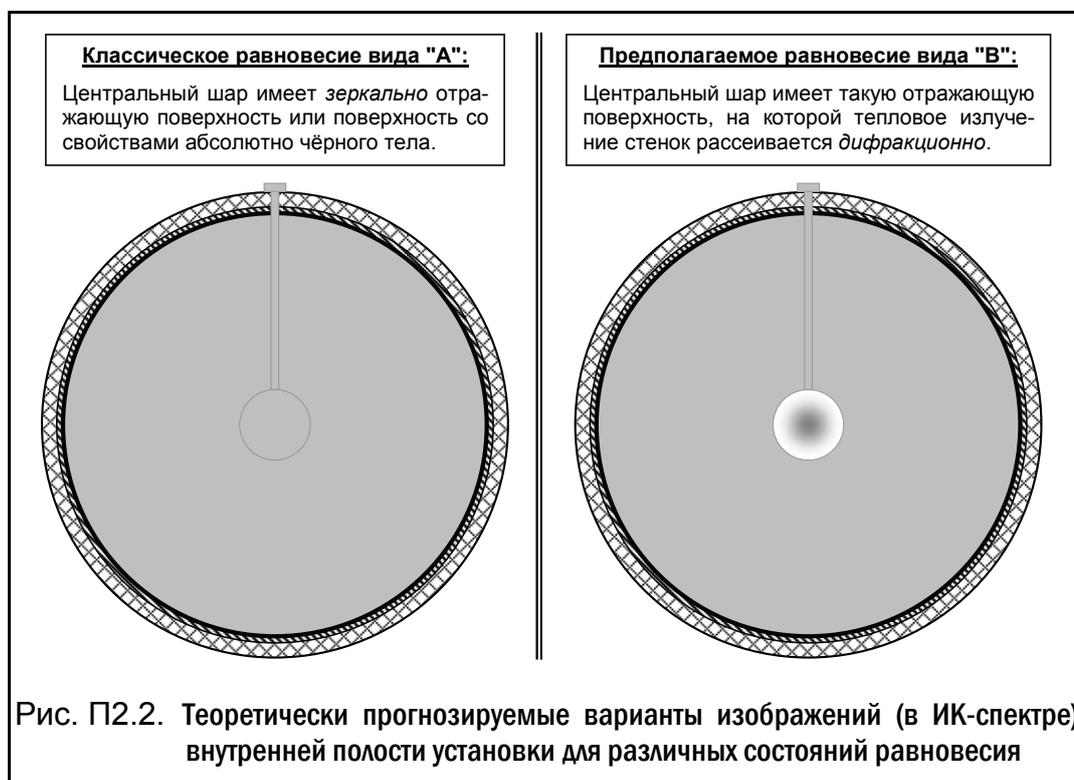
- От материала жёсткого подвеса 2 и конструкции его крепления к корпусу 1 требуется, чтобы подвес обеспечивал надёжную фиксацию шара 3 в центре рабочей полости установки. При этом наличие подвеса должно в минимальной степени влиять на картину наиболее вероятного (равновесного) теплового излучения внутри данной полости.

- Шар 3 необходимо изготовить, как минимум, в двух различных вариантах:
 - Первый шар должен иметь такую поверхность, которая способна *зеркально* отражать бóльшую часть падающего на неё равновесного теплового излучения. Например, это может быть шар, покрытый плёнкой золота или никеля (основной материал шара выбирается из технологических соображений). Средняя высота микрорельефа отражающей поверхности шара — должна быть значительно меньше величины, наиболее типичной для длин волн данного теплового ИК-излучения ($\lambda \approx 10 \text{ мкм}$).
 - Второй шар отличается от первого тем, что вертикальный масштаб микронеровностей его поверхности обеспечивает *дифракционное* рассеяние бóльшей части того теплового излучения в полости 1, которое взаимодействует с данной поверхностью. Например, для обеспечения рэлеевского [22, стр. 247] характера рассеяния теплового излучения с длиной волны $\lambda \approx 10 \text{ мкм}$ следует сформировать на поверхности этого шара (до нанесения на него отражающего покрытия) хаотический микрорельеф со среднеквадратичной высотой неровностей около $R_z \approx \lambda / (8 \cdot \cos \theta) \approx 1.77 \text{ мкм}$.

- Инфракрасная камера 4 предназначена для получения визуальной картины того теплового излучения, которое будет иметь место при различных реализациях наиболее вероятного макросостояния физического равновесия в системе. Так как максимальная плотность планковского спектра ИК-излучения при комнатной температуре $T \approx 290^\circ \text{ K}$ приходится на длину волны около $\lambda \approx 10 \text{ мкм}$ (см. стр. 68), то камера 4 должна быть работоспособна в ИК-области так называемого «далёкого инфракрасного излучения», к которой обычно относят диапазон волн от 5.6 мкм до $\sim 1000 \text{ мкм}$ [46, стр. 11-13]. В этих условиях необходимо использовать фото- или видеоаппаратуру, способную фиксировать ИК-излучение с длинами волн, по крайней мере, от $\lambda \approx 8 \text{ мкм}$ до $\lambda \approx 12 \text{ мкм}$. Для регистрации картины равновесного электромагнитного излучения в ограниченном диапазоне волн, на входе в камеру 4 могут быть установлены надлежащие ИК-фильтры.

Если теоретические предположения, излагаемые в настоящей работе, верны, то «тепловые портреты» наиболее вероятных (равновесных) физических макросостояний, реализуемых внутри установки при одинаковых внешних условиях, ожидаются такими:

- При использовании центрального шара 3, имеющего зеркальную поверхность (или поверхность со свойствами абсолютно чёрного тела), фиксируемое камерой 4 состояние равновесного теплового излучения должно выглядеть сугубо «классическим» образом. Иными словами, инфракрасное излучение внутри полости 1 будет иметь не только планковский спектр частот, но оно также должно быть совершенно изотропно и в пространственном отношении. Последнее обстоятельство приведёт к тому, что в данном состоянии теплового равновесия какие-либо элементы установки, находящиеся внутри полости 1 (например, шар 3 и его подвес 2), — будут совершенно невидимы на фоне внутренней поверхности указанной полости. Описанное состояние классического равновесия изображено на рис. П2.2, вариант "А".
- Если же центральный шар 3, имеющий отражающую поверхность со специальным микрорельефом, дифракционно рассеивает ИК-излучение стенок полости 1, то фиксируемая камерой 4 картина наиболее вероятного равновесного макросостояния должна выглядеть существенно иначе, чем в первом случае. Те участки поверхности шара 3, которые наблюдаются под большими (скользящими) углами зрения, будут выглядеть гораздо ярче, чем те участки, которые обозреваются под нормальными (отвесными) углами. Такая разница должна явиться прямым следствием нарушения закона Ламберта, предположительно имеющего место при дифракционном рассеивании поверхностью шара 3 теплового ИК-излучения, испускаемого стенками полости 1. Причина появления указанного эффекта станет понятней, если взглянуть на рис. 2.21 (стр. 55), иллюстрирующий перераспределение параметров движения частиц диффузного газа «в пользу» скользящих углов их рассеяния. Описанный случай предполагаемого состояния равновесия изображён на рис. П2.2, вариант "В".



Существует вероятность того, что эффект, внешне аналогичный изображённому на рис. П2.2 (вариант "В"), может быть результатом отражения поверхностью шара 3 (см. рис. П2.1 на стр. 172) объектива ИК-камеры 4, поскольку этот объектив, скорее всего, имеет немного иную термодинамическую температуру, чем температура внутренней поверхности полости 1. Для исключения влияния такого побочного эффекта на конечные выводы следует, например, путём варьирования текущей длины подвеса 2 сделать наблюдаемое ИК-камерой изображение шара существенно несоосным:

- Если получаемое изображение, аналогичное приведённому на рис. П2.2 ("В"), потеряет свою радиальную симметричность, то обнаруженный эффект, видимо, вызван отражением поверхностью шара неравновесного теплового излучения объектива ИК-камеры (возможно, это отражение будет «размыто» дифракцией).
- Если же неоднородная яркость поверхности шара сохранит свою радиальную симметричность и для существенно некоаксиальных случаев его расположения относительно объектива ИК-камеры, то наблюдаемый артефакт будет обусловлен именно прогнозируемым явлением.

Перечислим основные преимущества вышеизложенной методики проведения фотометрического эксперимента над тем вариантом, техническое задание которого было описано ранее (см. стр. 161):

1. Картина распределения ИК-излучения внутри установки, изображённой на рис. П2.1 (стр. 172), характеризуется объективным соответствием текущему *реальному* макросостоянию теплового равновесия в физической системе. Поэтому получаемые результаты выглядят более достоверно, чем, например, при работе с фотометрическим шаром, в котором световое поле формируется с помощью неравновесных процессов.
2. Преимущества образцов сферической формы перед плоскими образцами:
 - У каждого единичного образца сферической формы *одновременно* видны такие участки поверхности, которые наблюдаются под *разными* углами.
 - Автоматически реализуется требование статистического усреднения результатов наблюдений, поскольку для различных радиальных направлений (от центра сферического образца) одни и те же сочетания углов отражения осуществляются для разных азимутальных направлений на рассеивающей поверхности.
 - Два вышеприведённых обстоятельства существенно снижают размерность эксперимента. Это, в свою очередь, уменьшает число необходимых измерений от нескольких сотен (для каждого из плоских образцов), до, вообще говоря, единственного «теплового» ИК-снимка любого отдельного сферического образца.
 - У инфракрасных камер чувствительность к перепаду температур различных точек объекта, видимых *одновременно* (в одном кадре), приблизительно в 300 (триста) раз выше, чем точность измерения полной температуры различных (находящихся в разных кадрах) объектов. Поэтому разрешение «теплового портрета» сферической поверхности, элементы которой одновременно видны под разными углами, будет в сотни раз более высоким, чем при сравнении отдельных снимков плоских образцов, независимо выполненных под различными углами.
 - Наглядность результата эксперимента, представленного в форме одного-двух ИК-снимков сферических образцов, очевидно, гораздо значительней, чем изображаемый в виде графиков результат регрессионного анализа многих сотен замеров на плоских образцах. В последнем случае нельзя обойтись без громоздкого (а значит и малоубедительного) пояснения смысла полученных данных.

В качестве главного недостатка предлагаемого варианта эксперимента следует упомянуть необходимость использования столь редкой¹ и дорогостоящей аппаратуры, как длинноволновая инфракрасная камера («тепловизор») с прецизионным разрешением. Достаточно, например, сказать, что отнюдь не уникальная камера марки «ТН9100»² фирмы "NEC" имеет стоимость порядка 64900 USD. Специальная инфракрасная камера для научных исследований «ThermaCAM SC3000»³ фирмы "Flir Systems" стоит уже в несколько раз дороже. Таким образом, возможность практической реализации вышеописанного эксперимента зависит от решения проблемы финансирования проекта "Euler".



¹ Это обстоятельство сильно усложняет проведение данных работ в заказном порядке.

² Температурное разрешение – не лучше 0.06°C. Специальные лабораторные объективы для микросъёмки на малых расстояниях – комплектацией не предусмотрены.

³ Температурное разрешение – не менее 0.02°C. Комплектацией предусмотрены различные виды объективов, в том числе и для микросъёмки на малых расстояниях.

Приложение П3: Рецензия на депонирование (БГТУ, Петербург)

РЕЦЕНЗИЯ

на монографию В. В. Савукова "Уточнение аксиоматических принципов статистической физики".

Автор монографии предлагает теоретически обоснованное уточнение тех постулатов, на которых базируется аппарат статистической физики. Анализ работы позволяет сделать вывод о том, что данное уточнение носит вполне объективный характер и предполагает существенную практическую значимость. Тем не менее, окончательный вывод о корректности каких-либо аксиоматических принципов может быть сформирован только в ходе их прямой экспериментальной проверки. Поэтому настоящий материал следует рассматривать в качестве доказательства необходимости выполнения вышеуказанной проверки.

Содержание этой работы может представлять интерес для широкого круга специалистов в области статистической физики и термодинамики.

Рекомендую монографию "Уточнение аксиоматических принципов статистической физики" для депонирования в ВИНТИ.

Рецензент
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий каф. физики БГТУ:

 / Д. Л. Фёдоров /

Подпись рецензента проф. Д. Л. Фёдорова удостоверяю.

Ученый секретарь Ученого совета БГТУ  М. Н. Охочинский



Приложение П4: Рецензия политехнич. университета (СПбГПУ)

Федеральное агентство
по образованию

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет»
(ГОУ «СПбГПУ»)

ИНН 7804040077
195251, С.-Петербург, Политехническая ул., 29
Телефон (812) 247-20-95
E-mail: Postbox@spu.neva.ru
Факс 552-60-80

30.06.06 № К-79-89
На № 50/05-168 от 21.03.06

РЕЦЕНЗИЯ

на монографию В. В. Савукова

"Уточнение аксиоматических принципов статистической физики".

Монография посвящена результатам теоретического анализа и численного моделирования физических процессов, связанных с упругим отражением частиц газа, электронов и фотонов от поверхностей ограничивающего объема при различной структуре этих поверхностей. Автором разработана и предложена последовательность экспериментальных работ, по результатам которых могут быть сделаны выводы о корректности теоретического обоснования предложенных им уточнений. Работа представляет научный интерес и заслуживает экспериментальной проверки и публикации ее результатов для всестороннего обсуждения в кругах научной общественности.

Рекомендуем оказать автору организационную и материальную поддержку для проведения экспериментов.

Первый проректор



А.И. Рудской

Зав. кафедрой «Вакуумная электроника»
д.ф.-м.н., профессор

В.И. Дудкин

L

Изд-во СПбГПУ. З. 322-Б. Т. 4000. 2004.