

УДК 538+546.11

© 1992

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА СКОРОСТИ ПЕРЕХОДА МЕТАСТАБИЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФАЗЫ ВОДОРОДА В АТОМАРНУЮ КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ ФАЗУ

Ю. И. Шилов, Н. Р. Иванов

Представлены различные методы расчета скорости перехода метастабильного состояния молекулярной фазы водорода в атомарную кристаллическую фазу. Основные вычисления проведены методом траекторий, в основе которого заложен вариационный принцип. Рассмотрены еще два способа расчета скорости перехода, использующие различные приближения. Показано, что все входящие в выражения для скорости перехода величины могут быть связаны с известными параметрами, характеризующими точку перехода на кривой фазового равновесия.

В связи с попытками получения различных модификаций одних и тех же веществ при высоких давлениях, в частности молекулярного водорода, представляет интерес вычисление времени жизни возникающих метастабильных состояний. Особый интерес представляет оценка времени жизни соответствующих метастабильных состояний при низких температурах, поскольку именно при этих температурах ведутся эксперименты по обнаружению перехода молекулярной фазы водорода в атомарное кристаллическое состояние. В этом случае переход в устойчивое состояние новой фазы происходит не за счет термодинамических флуктуаций, а с помощью квантового механизма типа подбарьерного туннелирования.

Одной из первых работ, в которой квантовая кинетика фазовых переходов рассмотрена при температурах, близких к абсолютному нулю, является работа Лифшица и Кагана [1]. В ней вычисление соответствующих вероятностей было проведено в квазиклассическом приближении. Это оказалось возможным благодаря тому, что процесс образования зародышей новой фазы может быть сведен к туннельному движению системы под энергетическим барьером, отделяющим исходное метастабильное состояние от состояния с реальным зародышем новой фазы. Численная оценка скорости фазового перехода в области низких температур, когда зародыши просачиваются через потенциальный барьер с энергетических уровней, находящихся внутри потенциальной ямы, в этом приближении может быть выполнена различными способами.

Так, согласно методу, развитому в работе [2], конечным результатом для скорости распада низлежащих энергетических уровней в потенциальной яме путем подбарьерного просачивания являются выражения

$$\Gamma_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{A^2 R_0^2 M_{\text{эфф}}}{2\hbar\omega_0} \right]^n \Gamma_0,$$

$$\Gamma_0 = \left[\frac{\omega_0}{\pi \hbar} \right] \frac{AK_0 M_{эфф}^2}{2} e^{-\frac{\sigma}{\hbar}}, \quad (1)$$

где S_B — действие так называемого «отражения» $\bar{q}(\tau)$ или траектории, по которой движется зародыш в классически запрещенной области q под барьером; A — характерная константа, появляющаяся в асимптотическом поведении траектории $\bar{q}(\tau)$, которая отражается в точке возврата q_0 (точка, в которой потенциальная энергия частицы уходит в отрицательную область) в момент времени $\tau = 0$ и стремится к положению метастабильного состояния $q = 0$ по закону $\bar{q}(\tau) = A/2\omega_0 \exp(-\omega_0 \tau)$; ω_0 — частота «нулевых» колебаний в потенциальной яме. Таким образом, для численной оценки вероятностей распада низколежащих энергетических уровней этим методом необходимо определить вид оптимальной траектории движения зародыша под барьером, значение эффективного действия, которое имеет зародыш при таком движении, а также константу A в асимптотическом поведении траектории при $\tau = \pm \infty$, когда зародыш стремится к положению своего неустойчивого равновесия $q = 0$. (Классически устойчивое равновесное состояние зародыша внутри потенциальной ямы вблизи $q = 0$ становится неустойчивым ввиду возможности квантовомеханического просачивания зародыша под барьером).

Процедура нахождения оптимальных траекторий движения под барьером, их свойства, а также условия, которым должны удовлетворять такие «отражения», подробно изложены в работе [3]. Там же приведены ссылки на более ранние работы по этой проблеме, проведено обсуждение различия и сходства между ними и работой [3]. В данной работе рассматривается вопрос о вычислении скорости перехода молекулярной фазы водорода в кристаллическое состояние без учета диссипации. Рассмотренный и подробно обоснованный в работе [2, 3] общий формализм для изучения подбарьерных эффектов может быть применен для нахождения оптимальных траекторий движения зародыша под барьером и в конечном счете — к вычислению интересующей нас скорости перехода.

Согласно [3], оптимальной траекторией («отражением») является путь в конфигурационном пространстве, описываемый решением эйлер-лагранжевого уравнения, возникающего из мнимовременной версии гамильтонова принципа, а именно $\delta \int L_E dt = 0$, где $L_E = E_{кин} + V$ — Евклидов лагранжиан зародыша при его движении под барьером. При этом «отражение» должно удовлетворять следующим начальным и граничным условиям:

$$\bar{q}(\pm \infty) = 0, \quad \bar{q}(\tau = 0) = q_0, \quad \left. \frac{d\bar{q}}{d\tau} \right|_{\tau=0} = 0. \quad (2)$$

Таким образом, как говорят, частица движется под барьером вдоль пути наименьшего сопротивления. В нашем случае роль частицы играет зародыш новой фазы или, вернее говоря, флуктуация метастабильной фазы радиуса R . В приближении идеальной несжимаемой жидкости кинетическая энергия такой флуктуации имеет следующий вид [1]:

$$E_{кин} = 2\pi\rho_1 R_0^3 \kappa^3 \left(\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \right)^2 R_0^2 \kappa^2 = \frac{M_0 \kappa^3 \kappa^2}{2}, \quad (3)$$

где

$$M_0 = 4\pi\rho_1 R_0^5 \left(\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \right)^2,$$

ρ_2 и ρ_1 — плотности двух фаз на кривой фазового равновесия; $\kappa = R/R_0$ — безразмерный радиус зародыша; $R_0 = 3/2 R_{кр}$ — размер зародыша, при котором

потенциальная энергия флуктуации обращается в нуль; $R_{кр}$ — размер критического зародыша.

Потенциальная энергия флуктуации совпадает с минимальной энергией образования зародыша $R_{мин}(R)$ и определяется соотношением [4]

$$V(R) = 4\pi\alpha R^2 - \frac{8\pi\alpha R^3}{3R_{кр}} = 4\pi\alpha R_0^2 (1 - \kappa) \kappa^2, \quad (4)$$

где α — поверхностная энергия зародыша.

Зародыш с такой потенциальной энергией имеет хорошо локализованные квантовые состояния в яме вокруг $\kappa \approx 0$ с конечной вероятностью выхода через потенциальный барьер. Таким образом, эффективное действие зародыша при движении его под потенциальным барьером вдоль произвольной траектории имеет следующий вид:

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \frac{M_0 \dot{\kappa}^2}{2} + 4\pi\alpha R_0^2 (1 - \kappa) \kappa^2 \right\}. \quad (5)$$

Для нахождения «оптимальной» траектории, удовлетворяющей условиям (2), надо проварьировать действие S по координате κ , приравняв δS нулю, решить полученное таким образом дифференциальное уравнение второго порядка. Однако если выполнить эту процедуру для эффективного действия (5), то ввиду специфической зависимости эффективной массы зародыша от его размера получится весьма сложное, нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка, решить которое в аналитическом виде не представляется возможным.

Обойти эту трудность можно следующим образом. Вначале находим вид оптимальной траектории движения зародыша вблизи координаты $\kappa = 1$, где происходит ее отражение, считая при этом массу зародыша постоянной и равной его массе в этой точке. Вариация действия S , в котором масса зародыша положена равной M_0 , приводит к дифференциальному уравнению второго порядка следующего вида:

$$M_0 \ddot{\kappa} = U_0 \kappa (2 - 3\kappa),$$

$$U_0 = 4\pi\alpha R_0^2. \quad (6)$$

Его решение с учетом (2) представляет собой оптимальную траекторию движения зародыша вблизи точки отражения $\kappa = 1$

$$\kappa(\tau) = \frac{4e^{-\omega\tau}}{(1 + e^{-\omega\tau})^2},$$

$$\omega = \sqrt{2U_0/M_0}, \quad (7)$$

таким образом, зародыш находится вблизи $\kappa = 1$, время $\tau = 1/\omega$.

Для определения траектории движения вблизи начала координат $\kappa \approx 0$ представим кинетическую энергию зародыша (3) в виде

$$E_{\text{кин}} = \frac{M_{\text{эфф}} R_0^2 \dot{\chi}^2}{2},$$

определив $M_{\text{эфф}}$ из условия, что потенциальная энергия зародыша в этой области изменения χ может быть записана как

$$V(\chi) = \frac{M_{\text{эфф}} \omega_0^2 R_0^2 \chi^2}{2} = U_0 \chi^2,$$

где ω_0 — частота нулевых колебаний зародыша внутри потенциальной ямы, вычисленная с учетом зависимости его массы от координаты χ . В этом случае $M_{\text{эфф}} = 2U_0/\omega_0^2 R_0^2$ и действие S принимает более простой вид

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \frac{M_{\text{эфф}} R_0^2 \dot{\chi}^2}{2} + U_0 \chi^2 \right\}. \quad (8)$$

Его вариация по координате приводит к дифференциальному уравнению второго порядка

$$M_{\text{эфф}} R_0^2 \ddot{\chi}^2 = 2U_0 \chi, \quad \ddot{\chi} = \frac{2U_0 \chi}{M_{\text{эфф}} R_0^2} = \omega_0^2 \chi,$$

решение которого, удовлетворяющее требуемым условиям поведения на асимптотике, действительно может быть представлено в виде

$$\chi = \frac{A}{2\omega_0} e^{-\omega_0 t},$$

где A — пока произвольная характерная константа. Масса зародыша в этом случае вообще выпадает из рассмотрения, присутствуя лишь косвенным образом в ω_0 . После того как обе части оптимальной траектории найдены, они могут быть должным образом сшиты в произвольный пока момент времени $\tau_{\text{сш}}$. Константа A тогда определяется из условия равенства траекторий в этот момент и оказывается функцией $\tau_{\text{сш}}$

$$\frac{Ae^{-\omega_0 \tau_{\text{сш}}}}{2\omega_0} = \frac{4e^{-\omega \tau_{\text{сш}}}}{(1 + e^{-\omega \tau_{\text{сш}}})^2},$$

$$A = \frac{8\omega_0 e^{\tau_{\text{сш}}(\omega_0 - \omega)}}{(1 + e^{-\omega \tau_{\text{сш}}})^2}. \quad (9)$$

Полное действие зародыша при его движении под барьером

$$S_{\text{полн}} = 2 \int_0^{\infty} \left\{ \frac{M_0 \chi^3 \dot{\chi}^2}{2} + U_0 \chi^2 (1 - \chi) \right\} dt$$

может быть представлено как сумма двух слагаемых S_1 и S_2 , определяющих вклад каждой из двух частей оптимальной траектории в $S_{\text{полн}}$. Оно оказывается

также функцией только одного параметра $\tau_{\text{см}}$. Выбирая последний из условия минимума полного действия в $S_{\text{полн}} = S_1 + S_2$, находим все интересующие нас величины, входящие в выражения для индивидуальных скоростей распада энергетических состояний внутри потенциальной ямы.

Равновесная скорость распада метастабильной системы при конечной температуре T определяется как результат больцмановского усреднения индивидуальных скоростей распада Γ_n . Зафиксировав значение $R_{\text{кр}}$, при котором еще возможен макроскопический подход к решению задачи и при котором скорость образования зародышей максимальна, и производя усреднение по n для каждого значения температуры, получаем зависимость скорости фазового перехода от температуры с помощью рассмотренного вариационного метода.

Таким образом,

$$\Gamma(T, R_{\text{кр}}) = \sum_{n=0}^{n_1} \Gamma_n \exp(-E_n/kT) / Z_0,$$

где

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n/kT)$$

— статистическая сумма гармонического осциллятора. В гармоническом приближении $E_n = \hbar\omega_0(n + 1/2)$ и Z_0 может быть вычислена точно

$$Z_0 = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) / \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right)\right].$$

В этом случае $\Gamma(T, R_{\text{кр}})$ принимает следующий вид:

$$\Gamma(T, R_{\text{кр}}) = \sum_{n=0}^{n_1} \frac{\Gamma_n \exp(-E_n/kT)}{Z_0} = \left\{ \Gamma_0 + \Gamma_1 \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right) \right\} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right) \right\}. \quad (10)$$

В интересующей нас области изменения переменных T и $R_{\text{кр}}$ более высокие уровни в потенциальной яме отсутствуют. Выражение (10) получено в предположении, что система уровней зародыша в потенциальной яме аналогична энергетическому спектру гармонического осциллятора. В этом случае для определения частоты «нулевых» колебаний ω_0 зародыша внутри потенциальной ямы прежде необходимо определить частоту его колебаний с произвольной энергией E из решения классической задачи его движения вблизи минимума потенциальной энергии (4), где объемным членом в $V(R)$ можно пренебречь [1]. При таком движении выполняется закон сохранения энергии

$$\frac{M_0 \dot{\chi}^2}{2} + U_0 \chi^2 = E,$$

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{2(E - U_0 \kappa^2)}{M_0 \kappa^3}},$$

$$\omega(E) = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi}{2 \int_0^{\kappa(E)} \sqrt{M_0 \kappa^3 / 2(E - U_0 \kappa^2)} d\kappa} = \frac{\pi U_0^{5/4}}{\sqrt{M_0} E^{3/4}}. \quad (11)$$

Энергия основного уровня гармонического осциллятора $E = \hbar\omega_0/2$, поэтому

$$\omega_0 = \frac{\pi U_0^{5/4} 2^{3/4}}{M_0^{1/2} \hbar^{3/4} \omega_0^{3/4}},$$

$$\omega_0 = \frac{\pi^{4/7} U_0^{5/7} 2^{3/7}}{M^{2/7} \hbar^{3/7}}.$$

Для сравнения вычисление величины (10) было проведено другими традиционными способами. Так, $\Gamma(T, R_{\text{кр}})$ может быть представлена как аналогичным образом усредненная равновесная скорость распада метастабильной системы, в которой, однако, индивидуальные скорости распада уровней Γ_n вычисляются в квазиклассическом приближении

$$\Gamma_n = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp\left[-\frac{S(E)_n}{\hbar}\right], \quad (12)$$

где

$$S(E)_n = \int_{\kappa_{1n}}^{\kappa_{2n}} 2 |P(\kappa)| d\kappa$$

представляет собой действие зародыша с энергией E_n , движущегося по классической траектории внутри потенциального барьера [5]. Для определения зависимости $|P(\kappa)|$ при таком движении кинетическая энергия зародыша должна быть выражена через его обобщенный импульс

$$|P(\kappa)| = \frac{\partial E_{\text{кин}}}{R_0 \partial \dot{\kappa}} = \frac{M_0 \kappa^3 \dot{\kappa}}{R_0}.$$

Отсюда находим $\dot{\kappa} = R_0 |P| / M_0 \kappa^3$ и подставляем в исходное выражение для кинетической энергии

$$E_{\text{кин}} = \frac{M_0 \kappa^3 \dot{\kappa}^2}{2} = \frac{R_0^2 |P|^2}{2M_0 \kappa^3}.$$

Потенциальная энергия зародыша в этом случае определяется его движением вблизи вершины барьера и может быть представлена в следующем виде:

$$V(\kappa) = \frac{4}{3} \pi \alpha R_{\text{кр}}^2 - 4\pi \alpha (R - R_{\text{кр}})^2 = \frac{4}{27} U_0 - U_0 (\kappa - 2/3)^2,$$

где

$$U_0 = 4\pi\alpha R_0^2.$$

При движении под барьером снова должен выполняться закон сохранения энергии, и для $|P(x)|$ имеем следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \frac{R_0^2 P^2(x)}{2M_0 x^3} + \frac{4}{27} U_0 - U_0 \left(x - \frac{2}{3}\right)^2 &= E, \\ |P(x)| &= \sqrt{\frac{2M_0 x^3}{R_0^2} \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 \left(x - \frac{2}{3}\right)^2 - E_n \right\}}, \\ S(E_n) &= \int_{x_{1n}}^{x_{2n}} 2R_0 |P(x)| dx = \\ &= 2R_0 \int_{x_{1n}}^{x_{2n}} dx \sqrt{\frac{2M_0 x^3}{R_0^2} \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 \left(x - \frac{2}{3}\right)^2 - E_n \right\}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $x_{1n, 2n}$ — корни квадратного уравнения

$$\begin{aligned} 4/27 U_0 - U_0 (x - 2/3)^2 - E_n &= 0, \\ x_{1n, 2n} &= 2/3 \pm \sqrt{\frac{4}{27} - \frac{E_n}{U_0}}. \end{aligned}$$

Выражение для Γ_n в квазиклассическом приближении по форме принципиально отличается от Γ_n , полученных вариационным методом. В первом случае зависимость Γ_n от номера уровня перенесена из показателя экспоненты в предэкспоненциальный фактор.

В промежуточной области температур, когда зародыши выходят из потенциальной ямы с большей вероятностью уже не с основного энергетического уровня, а с некоторого возбужденного, номер которого в потенциальной яме зависит от температуры, скорость фазового перехода может быть вычислена также методом Аффлекса [6]. При ее вычислении должны быть сделаны три основных предположения: 1) сумма в уравнении (10) заменяется интегралом

$$\Gamma = Z_0^{-1} \int_0^{\infty} \rho(E) \Gamma(E) \exp(-E/kT) dE, \quad (14)$$

2) для скорости распада уровня с энергией E используется стандартный квазиклассический результат, а именно

$$\Gamma(E) = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp\left\{-\frac{S(E)}{h}\right\}, \quad (15)$$

3) при низких температурах интеграл доминирует при энергиях, близких к стационарной точке, определяемой уравнением

$$\frac{h}{kT} = -\frac{\partial S(E)}{\partial E} = T(E), \quad (16)$$

где $T(E)$ — период подбарьерного колебания зародыша. Конечный результат для $\Gamma(T, R_{кр})$ имеет в этой области температур следующий вид:

$$\Gamma(T, R_{\text{кр}}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{|T'(E_M)|}} \exp\left\{\frac{-|S'|}{\hbar} \left(V_0 - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)\right\}. \quad (17)$$

Можно показать, что соотношение

$$|S'(E)| = T(E) = \frac{2\pi}{\omega(E)}$$

действительно имеет место при движении зародыша под барьером. Так, согласно (13),

$$|S'(E)| = \sqrt{2M_0} \int_{x_1}^{x_2} \frac{x^3 dx}{\sqrt{x^3 \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 (x - 2/3)^2 - E \right\}}}, \quad (18)$$

с другой стороны, из закона сохранения энергии находим

$$\frac{M_0 x^3 \dot{x}^2}{2} = \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 (x - 2/3)^2 \right\} - E.$$

Отсюда

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2}{M_0 x^3} \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 (x - 2/3)^2 - E \right\}},$$

окончательно

$$T = 2 \int dt = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2M_0} x^3 dx}{\sqrt{x^3 \left\{ \frac{4}{27} U_0 - U_0 (x - 2/3)^2 - E \right\}}},$$

что совпадает с выражением (18) для $|S'(E)|$. Интеграл легко вычисляется, и в результате получаем

$$|S'(E)| = T(E) = 2\sqrt{\frac{2M_0}{U_0}} \left\{ 2/3 + \sqrt{\frac{4}{27} - \frac{E}{U_0}} \right\}^{3/2}. \quad (19)$$

Таким образом, период колебания зародыша под барьером возрастает при уменьшении энергии зародыша в потенциальной яме. Такая зависимость периода подбарьерных колебаний зародыша от энергии обусловлена возрастанием эффективной массы вовлекаемого в движение вещества метастабильной фазы.

Уравнение (16) позволяет, зная зависимость $T(E)$, непосредственно для любого значения $R_{\text{кр}}$ определить тот температурный интервал, в котором справедливо такое рассмотрение. В этом интервале $\Gamma(T, R_{\text{кр}})$, согласно (17), возрастает и на верхнем пределе переходит в выражение, описывающее надбарьерное прохождение зародышей, имеющих в этой области непрерывный энергетический спектр. При температурах, меньших нижней границы этого интервала, выражение (17) для $\Gamma(T, R_{\text{кр}})$ становится несправедливым, так как оно должно описывать скорость рождения зародышей с основного уровня и экспоненциальная зависимость

от температуры должна исчезнуть. Экстраполяция $\Gamma(T, R_{кр})$ в эту область температур, несмотря на внешнее различие, практически совпадает с вычислением $\Gamma(T, R_{кр})$ в квазиклассическом приближении и методом траекторий. Совпадение происходит как раз в области температур, непосредственно примыкающей к нижней границе интервала, что подтверждает корректность перехода от суммирования при больцмановском усреднении индивидуальных скоростей распада к интегрированию в методе Аффлека. Только с ростом температуры равновесная скорость распада, полученная как результат усреднения Γ_n с помощью статистической суммы Z_0 , согласно (10), возрастает не так быстро, как в методе Аффлека, что отражает, по-видимому, ограниченный характер такого усреднения, не учитывающего влияния на распад непрерывной части энергетического спектра зародышей, которое становится существенным при повышении температуры.

Итак, для задачи квантового подбарьерного распада метастабильного состояния существенную роль играют параметры потенциальной ямы, спектр колебательных уровней в ней, а также период колебания зародыша с переменной массой внутри потенциального барьера. Для численной оценки скорости перехода молекулярной фазы водорода в атомарное кристаллическое состояние существенную роль играют параметры потенциальной ямы, в частности эффективная масса зародыша

$$M_0 = 4\pi\rho_1 R_0^5 \left(\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \right)^2$$

и его поверхностная энергия α . Величины ρ_2 и ρ_1 представляют собой плотности новой и старой фаз на кривой фазового равновесия в точке перехода. Согласно данным работы [7], эти плотности соответственно равны $\rho_2 = 1.1$, $\rho_1 = 1$ г/см³. Параметр R_0 зависит от приложенного к веществу давления и поэтому является управляемым параметром. Поверхностная энергия α также может быть выражена через параметры, характеризующие фазовый переход. Будем считать молекулярный водород находящимся в жидкой фазе. В этом случае зависимость коэффициента поверхностного натяжения жидкости от температуры вдоль кривой фазового равновесия выражается равенством [8]

$$\frac{d\alpha}{dT} = B \left(\frac{\rho}{\mu} \right)^{2/3}, \quad (20)$$

где $B = 2.1$ г·см⁻²·с⁻²·град⁻¹, ρ — плотность в точке перехода, μ — грамм-молекула начальной фазы.

Используя условие, что в критической точке обе фазы становятся тождественными, поверхность раздела между ними перестает существовать и коэффициент поверхностного натяжения обращается в нуль, зависимость α от температуры можем записать в виде

$$\alpha = B (\rho/\mu)^{2/3} T_0 \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) = \alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_0} \right),$$

где $\alpha_0 = B (\rho/\mu)^{2/3} T_0 = 6.6 \cdot 10^3$ эрг·см⁻², $T_0 = 5 \cdot 10^3$ К — критическая температура. Остальные параметры связаны с этими основными

$$U_0 = 4\pi\alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) R_0^2, \quad \omega = \sqrt{\frac{2U_0}{M_0}} = \sqrt{-\frac{2\alpha_0 (1 - T/T_0)}{\rho_1 R_0^3 \left(\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \right)^2}},$$

$$\omega_0 = \frac{\pi^{4/7} U_0^{5/7} 2^{3/7}}{M_0^{2/7} \hbar^{3/7}}. \quad (21)$$

Итак, все входящие в выражения для скорости фазового перехода величины могут быть связаны с известными параметрами, характеризующими точку перехода на фазовой кривой.

Вычисления были проведены только для одного значения размера критического зародыша $R_{кр} = 1.2 \cdot 10^{-8}$ см, при котором еще возможен макроскопический подход к решению задачи и при котором скорость образования зародышей максимальна.

Анализ полученных зависимостей позволил сделать вывод, что использование различных методов расчета равновесной скорости распада интересующей нас метастабильной системы, в том числе и рассмотренного вариационного метода, дает по крайней мере до температур порядка 500 К близкие результаты, а сама скорость образования зародышей атомарной фазы водорода оказывается равной по порядку величины 10^{12} с^{-1} .

В дальнейшем будет показано, как вариационный метод должен быть модифицирован с целью использования его для изучения влияния диссипативных процессов на скорость интересующего нас фазового перехода.

Список литературы

- [1] Лифшиц И. М., Каган Ю. М. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 1. С. 385—402.
- [2] Weiss U., Haeffner W. // Physical Rev. D. 1983. V. 27. N 2. P. 2916—2927.
- [3] Coleman S. // Phys. Rev. D. 1977. N 15. P. 2929.
- [4] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Т. 5. М., 1976. 582 с.
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Т. 3. М., 1974. 217 с.
- [6] Affleck F. // Phys. Rev. Letters. 1981. V. 46. N 6. P. 388—391.
- [7] Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л., Толочко А. П., Урлин В. Д. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 1683.
- [8] Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И. К. Кикоина. М., 1976.

Поступило в Редакцию
21 мая 1991 г.
В окончательной редакции
18 сентября 1991 г.