Доклады Академии Наук СССР
1949, Том LXV, № 5

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Академик А. Н. КОЛМОГОРОВ

К ВОПРОСУ О „ГЕОМЕТРИЧЕСКОМ ОТБОРЕ“ КРИСТАЛЛОВ

В 1945 г. ко мне обратился Г. Г. Леммлейн с просьбой дать математическую теорию „геометрического отбора“ кристаллов, зарождающихся на границе кристаллизирующейся массы. Г. Г. Леммлейн предоставил в мое распоряжение богатый материал фотографий с реальных физических опытов над ростом кристаллов между двумя параллельными стеклянными пластинками (такого рода опыты еще в 1927 г. были произведены А. В. Шубниковым и Г. Г. Леммлейном ([1])) и схематических графических опытов, в которых реальные кристаллы заменялись постепенно наращивавшимися геометрическими фигурами, начальная ориентация которых выбиралась случайно (при помощи таблиц „случайных чисел“). Все эти материалы относились к плоской задаче (см. ([2])).

Грубый ориентировочный анализ задачи тогда же привел меня к выводу, что для случая бесконечной полуплоскости, ограниченной снизу горизонтальной прямой, вероятность взятому наудачу кристаллу вырасти (не будучи остановленным другими конкурирующими кристаллами) до высоты h должна при больших h подчиняться асимптотической формуле

$$P(h, \lambda) = c\sqrt{\frac{s}{\lambda h}}, \tag{1}$$

где c — одинаковая для всех (плоских) кристаллов константа, s — число направлений максимального роста ($s=2$ в случае квадратов, $s=1$ в случае ромбов и т. д.), λ — среднее число зародышей кристаллов на единицу длины прямой, ограничивающей полуплоскость.

В соответствии с формулой (1) число кристаллов $N(h)$, достигающих высоты h, из общего числа $N_0 \sim \lambda v$, возникших на участке границы длины v, в случае достаточно большого N_0 вычисляется приближенно по формуле

$$N(h) \sim N_0 P(h, \lambda) \sim c\sqrt{\frac{s\lambda}{h}}\, v.$$

Таким образом, среднее на единицу длины (по горизонтали) число кристаллов, достигших высоты h, при больших h асимптотически выражается формулой

$$N(h) = \frac{k}{\sqrt{h}}, \tag{2}$$

где

$$k = c\sqrt{s\lambda}.$$

В аналогичным образом идеализированной пространственной задаче рассматривается полупространство, ограниченное снизу плоскостью. Кристаллы зарождаются на этой плоскости в среднем по λ на единицу площади со случайной ориентацией каждого зародыша. В этом случае соображения подобия приводят к асимптотической формуле (при $h \to \infty$)

$$P(h, \lambda) = \frac{c'}{\sqrt{\lambda h}}, \tag{3}$$

где константа c' более сложным образом зависит от формы кристаллов. Для среднего на единицу площади числа $N(h)$ кристаллов, достигающих высоты h, из (3) получаем

$$N(h) = \frac{k'}{h}, \tag{4}$$

где

$$k' = c' \sqrt{\lambda}.$$

Однако, даже в плоском случае, строгое решение задачи и вычисление константы c в формуле (1) оказалось делом не очень простым, ввиду чего работа над этими вопросами мною не была закончена.

В 1946 г. А. В. Шубников опубликовал в заметке ([3]) свое решение задачи. В этой заметке он приходит вместо (2) и (4) к формулам

$$N(h) = \frac{k}{h} \quad \text{в плоском случае,}$$

$$N(h) = \frac{k'}{h^2} \quad \text{в пространственном случае.}$$

Это заставило меня и моих сотрудников вернуться к вопросу геометрического отбора кристаллов. В частности, Н. А. Дмитриев показал, что в плоском случае можно с полной математической строгостью установить неравенство

$$P(h, \lambda) > \frac{A}{\sqrt{\lambda h}}, \tag{5}$$

где A — некоторая константа. Отсюда вытекает, что формула А. В. Шубникова для плоского случая ошибочна. Ошибка аргументации А. В. Шубникова заключается в предположении, что „поперечник равномерно растущего двумерного кристалла пропорционален его высоте“ ([3]). На самом деле, в нашей задаче при h значительно больших, чем расстояния между зародышами

$$l = \frac{1}{\lambda},$$

выживают лишь кристаллы с почти параллельными направлениями максимального роста, эти же выжившие кристаллы растут в виде очень вытянутых почти параллельных столбиков. Эта ошибка в аргументации относится одинаково и к плоскому и к пространственному случаю.

Лишь недавно мне удалось для плоского случая строго доказать асимптотическую формулу (1). К сожалению, полученное мною выражение для константы c в этой формуле довольно сложно:

$$c = \lim_{n \to \infty} \left(\frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \ldots (2n-1)}{2^{2n+1}} I_n \right), \tag{6}$$

или

$$c = \lim_{n \to \infty} \left(\frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \ldots (2n-1)}{2^{2n}} I_n' \right), \tag{7}$$

где I_n есть интеграл

$$I_n = \iint\limits_{G_n} \cdots \int (\eta_1 + \theta_1 \eta_2 + \theta_2 \eta_3 + \cdots + \theta_{n-1} \eta_n)^{-n-\frac{1}{2}} d\theta_1 \cdots d\theta_n \, d\eta_1 \cdots d\eta_n$$

по $2n$-мерной области G_n, определяемой неравенствами

$$1 > |\theta_1| > |\theta_2| > \cdots > |\theta_n|,$$

$$\left.\begin{array}{r}\eta_k > 0, \\ \eta_1 + \eta_2 + \cdots + \eta_k > 1 - \theta_k\end{array}\right\} k = 1, 2, \ldots, n;$$

I_n' есть интеграл точно того же вида, но взятый только по той части области G_n, на которой $\theta_n < 0$.

В формуле (6) выражение под знаком предела при любом $n \geqslant 1$ больше истинного значения константы c, а в формуле (7) меньше. Поэтому, вычислив при $n = 1$

$$I_1 = \int_{-1}^{+1} \left(\int_{1-\theta}^{\infty} \eta^{-3/2}\, d\eta \right) d\theta = 4\sqrt{2},$$

$$I_1' = \int_{-1}^{0} \left(\int_{1-\theta}^{\infty} \eta^{-3/2} d\eta \right) d\theta = 4(\sqrt{2} - 1),$$

получаем оценки

$$0{,}91 \sim \pi \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) < c < \frac{\pi}{2} \sim 1{,}57.$$

При $n = 2$ получаем аналогично

$$1{,}124 < c < 1{,}203.$$

Полное математическое решение плоской задачи будет опубликовано в другом месте. Здесь я ограничусь изложением общей геометрической идеи вывода формулы (1), не касаясь вывода формул (6) и (7) для константы c.

Естественно ожидать, что большой высоты h могут достигнуть, не будучи остановлены другими, лишь те кристаллы, у которых одно из направлений максимального роста почти вертикально. Что же касается конкуренции между собою такого рода кристаллов, то оказывается, что ее результаты можно с хорошим приближением рассчитать, заменив кристаллы бесконечно тонкими иглами, растущими лишь в направлении максимального роста этих кристаллов. Более точно, имеет место такое положение вещей, что *асимптотически при $h \to \infty$ для любого типа кристаллов*

$$P(h, \lambda) \sim s P_0(h, \lambda'), \tag{8}$$

где $P_0(h, \lambda')$ есть аналогичная вероятность для игл, вычисленная с заменой первоначальной плотности λ на плотность

$$\lambda' = s\lambda.$$

Обратимся к случаю кристаллов в форме игл и обозначим через $P_0(h, \lambda, \alpha)$ вероятность достигнуть высоты h игле, направление которой отклоняется от вертикального на угол α. Очевидно, что

$$P_0(h, \lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} P_0(h, \lambda, \alpha)\, d\alpha. \tag{9}$$

Из тривиальных соображений подобия вытекает, что $P(h, \lambda, \alpha')$ на самом деле зависит лишь от α и произведения λh

$$P_0(h, \lambda, \alpha) = Q(\lambda h, \alpha). \tag{10}$$

При $\alpha \to 0$ асимптотически имеет место еще более простое соотношение:

$$P_0(h, \lambda, \alpha) \sim R(\lambda h \alpha^2), \tag{11}$$

т. е. $P_0(h, \lambda, \alpha)$ зависит лишь от произведения

$$\xi = h\lambda\alpha^2.$$

В самом деле, оставив вертикальные масштабы без изменения, а горизонтальные увеличив в k раз, мы можем перевести первоначально заданную картину конкуренции кристаллов в новую, где углы α, близкие к нулю, увеличатся в k раз, т. е. перейдут в углы

$$\alpha' \sim k\alpha.$$

Вероятность на участке начальной прямой длины

$$dx' = k\,dx$$

встретить в преобразованной картине зародыш иглы с направлением между α' и $\alpha' + d\alpha'$ будет равна

$$\frac{1}{\pi}\,\lambda\,dx\,d\alpha \sim \frac{1}{\pi}\frac{\lambda}{k^2}\,dx'\,d\alpha'.$$

Преобразованная картина будет соответствовать поэтому плотности расположения зародышей

$$\lambda' = \frac{\lambda}{k^2}.$$

Это значит, что приближенно при малых α

$$P_0(h, \lambda, \alpha) \sim P_0\left(h, \frac{\lambda}{k^2}, k\alpha\right),$$

что и приводит вместе с (10) к формуле (11).

При больших h в интеграле (9) существенны лишь малые значения α. Это позволяет применить формулу (11) и получить асимптотически при $h \to \infty$

$$P_0(h, \lambda) \sim \frac{2}{\pi}\int_0^\infty R(\lambda h\alpha^2)\,d\alpha = \frac{c}{\sqrt{\lambda h}}, \tag{12}$$

где

$$c = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty R(\xi)\,d\xi.$$

Вывод этот может быть путем введения довольно сложных предосторожностей сделан совершенно строгим. Из (12) и (8) непосредственно вытекает (1).

Соображения, приводящие к формуле (3) в пространственном случае, несколько сложнее (случайно ориентированные иглы без толщины в пространстве вообще не сталкиваются друг с другом и поэтому непосредственно не могут быть использованы). Безукоризненного вывода этой формулы я еще не имею.

Поступило
23 II 1949

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] А. В. Шубников и Г. Г. Леммлейн, ДАН, стр. 61 (1927). [2] Г. Г. Леммлейн, ДАН, 48, 177 (1945). [3] А. В. Шубников, ДАН, 51, 679 (1946).