

ISSN 0253—2778

中国科学技术大学学报

第17卷

第3期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 17

No. 3

3

1987

中国科学技术大学学报

第 17 卷 第 3 期 (总第 55 期)

目 录

- 对称典型域的解析自同胚最大群..... 殷慰萍 (291)
- 激波数值模拟的一个简单有效的方法..... 刘儒勋 魏 勇 (303)
- Einstein 引力作为高维时空中物质场的量子效应..... 莫厚俊 高怡泓 (317)
- 用光电化学方法研究硫酸溶液内铅电极上钝化膜的一些性质
..... 杭 珊 D.S.Nadezhdin R.G.Barradas (330)
- 原白头翁素的提取、合成及保存研究..... 朱胄远 杨 云等 (336)
- 锡和锌复合氧化物的合成及其缺陷结构..... 陈祖耀 贾 瑛等 (343)
- 相互作用体系的极化率..... 刘凡镇 辛厚文 (352)
- 关于 Morison 方程中耦合项的研究..... 卢耘耘 王秀喜 (359)
- 114 微机自动查号系统 周 勇 王仁华 刘必成 (369)
- 特征轨迹—交互控制器设计方法..... 庞国仲 濮洪钧 (375)
- 分析湍流间歇性的双流体模型..... 范维澄 郑丽丽 (385)

研 究 简 报

- 在 X 射线剂量测量中的电离室有效中心..... 李启明 冯正永等 (391)
- 等离子体拍波加速器中的激光束自聚焦..... 汪秉宏 G.Schmidt (395)
- Hill 变分原理的推广..... 何竹修 (399)
- 安徽铜陵铜官山矿田火成岩的同位素地质年龄..... 周泰禧 李学明等 (403)
- 马山金矿的同位素组成..... 李学明 李彬贤等 (408)
- 用 μ 子探测高楼重量..... 程纯杰 (414)
- 用 X 射线荧光滤纸片法同时分析七种单一稀土元素..... 赵贵文 唐予奇 毛振伟 (419)

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 17 No.3 (Sum No. 55)

CONTENTS

- On the Groups of Analytic Automorphisms of Cartan Domains
..... Yin Weiping (291)
- A Simple and Convenient Approach Simulation of Shock Waves
.....Liu Ruxun, Wei Yong (303)
- Einstein Gravitation as Quantum Effect of Matter Fields in High
Dimensional Space-TimeMo Houjun, Gao Yihong (317)
- Photoelectrochemical Study on Some Properties of Passive Films on
the Lead Electrode in H_2SO_4 Solution
.....Hong Hu, D. S. Nadezhdin, R. G. Barradas (330)
- Studies on the Extraction, Synthesis and Preservation for
Protoanemonin.....Zhu Zhouyuan, Yang Yun et al. (336)
- The Preparation and Its Defect Structure of Tin and Zinc
Complex Oxide Chen Zuyao, Jia Ying et al. (343)
- Polarizabilities of Interacting Systems
.....Liu Fanchen, Xin Houwin (352)
- On the Coupling Terms Between the Motion of Structure and Fluid
in Morison EquationLu Yunyun, Wang Xiuxi (359)
- A 114 Microcomputer Directory Assistance System
.....Zhou Yong, Wang Renhua, Liu Bicheng (369)
- The Characteristic Loci-Commutative Controller Method
.....Pang Guozhong, Pu Hongjun (375)
- A Two-Fluid Model of Turbulence Applied to Intermittency
of Turbulent Free Jets.....Fan Weicheng, Zheng Lili (385)

Research Notes

The Effective Center of Ionization Chamber in Measurement

of X-Ray Dosage.....	Li Qimin, Feng Zhengyong et al.	(391)
Self Focusing of Laser Beams in the Plasma Beat-Wave Accelerator	Wang Binghong, G. Schmidt	(395)
Generlization of Hill's Variational Principle	Her Jurshiou	(399)
Geochronology of Igneous Rocks from the Tongguanshan Ore Area of Anhui Province	Zhou Taixi, Li Xueming et al.	(403)
Isotopic Compositions of Mashan Gold Deposits	Li Xueming, Li Binxian et al.	(408)
The Estimation of the Weight of High Building Using μ	Chen Chunjie	(414)
Determination of 7 Rare Earth Elements Simultaneously by X-Ray Fluorescence with an Improved Filter Paper Tecnique	Zhao Guiwen, Tang Yuqi, Mao Zhenwei	(419)

对称典型域的解析自同胚最大群

殷慰萍

(数学系)

摘 要

如何确定对称典型域(即 Cartan 域)的解析自同胚最大群?这是一个很有趣的问题。C. L. Siegel 在 1943 年首先解决了第二类典型域 R_{II} 的问题^[1]。H. Klingen 在 1955 年、1956 年和 1960 年分别解决了第一类域 R_I 、第三类域偶阶和第三类域奇阶时的相应问题^[2-4]。作者和钟家庆也解决了第三类域的问题^[5]。但方法各异。本文说明我们在 [5] 所用的方法,即利用 Bergman 度量方阵,也可以用来解决其它类型的对称典型域的上述问题。

关键词: 自同胚, 全纯映照, 矩阵群。

E. Cartan 1935 年对 C^n 中的不可约有界对称域进行了分类,共有四大类和两个例外域,其矩阵实现如下:

$$R_I(m, n) = \{Z | I - Z\bar{Z}' > 0, Z \text{ 是 } m \times n \text{ 复数矩阵}\}.$$

$$R_{II}(p) = \{Z | I - Z\bar{Z}' > 0, Z \text{ 是 } p \text{ 阶对称方阵}\}.$$

$$R_{III}(q) = \{Z | I - Z\bar{Z}' > 0, Z \text{ 是 } q \text{ 阶斜对称方阵}\}.$$

另外两个例外域的矩阵实现可见 [6].

这几类域华罗庚称之为典型域,但自 1959 年 Pyateckii-Shapiro 给出有界非对称线性域的第一个例子,从而给著名的 Cartan 猜想以否定回答之后,又称之为对称典型域。近年来,国际上又将它们称之为 Cartan 域。

熟知,这四类典型域分别容许以下的解析自同胚群^[1]:

$$\Gamma_I = \{(AZ + B)(CZ + D)^{-1} | \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \in U(m, n), \det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = 1\}$$

其中 A, B, C, D 分别为 m 阶, $m \times n$, $n \times m$, m 阶矩阵且适合 $A\bar{A}' + C\bar{C}' = I, B\bar{B}' + D\bar{D}' = I, B\bar{C}' + D\bar{A}' = 0$.

1985 年 12 月 30 日收到。

中国自然科学基金资助项目。

$$\overline{\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}}' \begin{pmatrix} I^{(n)} & 0 \\ 0 & -I^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I^{(n)} & 0 \\ 0 & -I^{(m)} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_{II}: \quad W = (AZ + B)(\bar{B}Z + \bar{A})^{-1}$$

其中 A, B 都是 p 阶方阵, 适合

$$\overline{\begin{pmatrix} A & B \\ \bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix}}' \begin{pmatrix} I^{(p)} & 0 \\ 0 & -I^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ \bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I^{(p)} & 0 \\ 0 & -I^{(p)} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_{III}: \quad W = (AZ + B)(-\bar{B}Z + \bar{A})^{-1}$$

其中 A, B 为 q 阶方阵, 适合

$$\overline{\begin{pmatrix} A & B \\ -\bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix}}' \begin{pmatrix} I^{(q)} & 0 \\ 0 & -I^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ -\bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I^{(q)} & 0 \\ 0 & -I^{(q)} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_{IV}: \quad w = \rho^{-1} \left\{ \frac{1}{2}zz' + 1, \quad izz' - i \right\} C' + zD'$$

其中

$$\rho = \begin{cases} \left[\frac{1}{2}(zz' + 1, \quad izz' - i)A' + zB' \right] \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} & \text{当 } \det A > 0 \\ \left[\frac{1}{2}(zz' + 1, \quad izz' - i)A' + zB' \right] \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} & \text{当 } \det A < 0 \end{cases}$$

而且 A, B, C, D 分别为 $2 \times 2, 2 \times N, N \times 2, N \times N$ 实矩阵, 适合

$$AA' - BB' = I, \quad AC' = BD', \quad CC' - DD' = -I$$

特别, 使原点不变的子群分别是

$\Gamma_{I}^0: W = UZV, U, V$ 分别为 m 阶和 n 阶酉方阵;

$\Gamma_{II}^0: W = U'ZU, U$ 为 p 阶酉方阵;

$\Gamma_{III}^0: W = UZU, U$ 为 q 阶酉方阵;

$\Gamma_{IV}^0: w = e^{i\theta}zD, D$ 为 N 阶实正交方阵.

一个很重要的问题是, 这类典型域的任何一解析自同胚是否一定是上述形式? 正如摘要中所述, 这问题已解决, 但方法各异. 本文证明, 作者和钟家庆在文[5]中所用以对第三类典型域解决这问题的方法, 完全可用于解决其它对称典型域(例外域除外)的同样问题, 而无需引进别的方法.

1 基本事实和记号

1.1 为了证明 R_j 的解析自同胚最大群 G_j 就是 Γ_j^0 , 只要证明原点的固定分群就是 Γ_j^0 ($j = I, II, III, IV$). 事实上, 若 $g \in G_j$, 则 g 必将 R_j 内某一点 a 变为原点. 但存在 $h \in \Gamma_j^0$, 使得 $h(a) = 0$. 故 $\tau = gh^{-1}$ 是 R_j 的保持原点不变的解析自同胚, 因此 $\tau \in \Gamma_j^0$. $g = \tau h$, 因此 $g \in \Gamma_j^0$ ($j = I, II, III, IV$).

1.2 任何一个以原点为中心的有界圆型域的保持中心不变的解析自同胚, 必为酉线性变换^[8].

1.3 设全纯映照 $w = f(z)$, 把有界齐性域 D 一一映为 G , 则 $T_D(z, \bar{z}) = \frac{\partial w}{\partial z} T_G(w, \bar{w})$

$\frac{\partial w}{\partial z}$, 其中 $T_D(z, \bar{z})$, $T_G(w, \bar{w})$ 分别表示 D, G 的 Bergman 度量方阵, $\frac{\partial w}{\partial z}$ 表示上述映照的函数矩阵^[8].

1.4 由 1.2 知, 若 S 是 R_I 的保持原点不变的解析自同胚, 则 S 可写为

$$w = zA \quad (1)$$

其中

$$z = (z_{11}, z_{12}, \dots, z_{1n}, z_{21}, z_{22}, \dots, z_{2n}, \dots, z_{m1}, z_{m2}, \dots, z_{mn})$$

$$w = (w_{11}, w_{12}, \dots, w_{1n}, w_{21}, w_{22}, \dots, w_{2n}, \dots, w_{m1}, w_{m2}, \dots, w_{mn})$$

$$A = \frac{\partial w}{\partial z} \text{ 是 } mn \text{ 阶常数酉方阵.}$$

将向量 w 排成下列 $m \times n$ 矩阵

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{m1} & w_{m2} & \dots & w_{mn} \end{pmatrix} \quad (2)$$

则 (1) 式可写为

$$W = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m z_{ij} A_{ij} \quad (3)$$

其中 A_{ij} 为方阵 A 中的第 (ij) 行向量按 (2) 的方法所排成的 $m \times n$ 矩阵.

1.5 由 1.2 知, 若 S 为 R_{II} 的保持原点不变的解析自同胚, 则 S 可写为

$$w = zB \quad (4)$$

其中

$$z = (z_{11}, z_{12}, \dots, z_{1p}, z_{21}, z_{22}, z_{23}, \dots, z_{2p}, \dots, z_{p-1p-1}, z_{p-1p}, z_{pp})$$

$$w = (w_{11}, w_{12}, \dots, w_{1p}, w_{21}, w_{22}, w_{23}, \dots, w_{2p}, \dots, w_{p-1p-1}, w_{p-1p}, w_{pp})$$

$$B = \frac{\partial w}{\partial z} \text{ 为 } \frac{1}{2}p(p+1) \text{ 阶常数酉方阵.}$$

将上述 w 排成 p 阶对称方阵如下:

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1p} \\ w_{12} & w_{22} & \dots & w_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{1p} & w_{2p} & \dots & w_{pp} \end{pmatrix} \quad (5)$$

则 (4) 式可写为

$$W = \sum_{i \leq j=1}^p z_{ij} B_{ij} \quad (6)$$

其中 B_{ij} 为 B 中第 (ij) 行向量按 (5) 的方法排成的 p 阶对称方阵.

1.6 今后, 在论述 R_I 时, I_{ij} 总表示 (i, j) 处的元素为 1, 其余元素为 0 的 $m \times n$ 矩

阵. 在论述 $R_{\mathbb{R}}$ 时, 总以 $I_{i,j}$ 表示 (i, j) 处和 (j, i) 处元素都为 1, 其余元素都为 0 的 p 阶对称方阵.

2 预备定理

引理 1 设 $w = f(Z)$ 为 $R_{\mathbb{R}}$ 的保持原点不变的解析自同胚, 则点 Z 和象点 w 有相同的秩, 而且 $Z\bar{Z}'$ 和相应的 $w\bar{w}'$ 有相同的特征根.

证 设 $T_{\mathbb{R}}(Z, \bar{Z})$ 为 $R_{\mathbb{R}}$ 的 Bergman 度量方阵, 由 1.3 得

$$T_{\mathbb{R}}(Z, \bar{Z}) = \frac{\partial w}{\partial Z} T_{\mathbb{R}}(w, \bar{w}) \frac{\partial \bar{w}'}{\partial \bar{Z}} = A T_{\mathbb{R}}(w, \bar{w}) A' \quad (7)$$

由于 $T_{\mathbb{R}}(Z, \bar{Z}) = (m+n)(I - \bar{Z}Z')^{-1} \times (I - Z\bar{Z}')^{-1}$, A 为酉方阵, 因此有

$$(I - \bar{Z}Z') \times (I - Z\bar{Z}') = A[(I - \bar{w}w') \times (I - w\bar{w}')]A'$$

对 $Z \in R_{\mathbb{R}}$, 存在酉方阵 U 和 V 使得

$$Z = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_m & \\ & & & 0 \end{pmatrix} V \quad (9)$$

其中 $1 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0$, $\lambda_1^2, \dots, \lambda_m^2$ 为 $Z\bar{Z}'$ 之特征根. 对相应的 w 也存在酉方阵 U_1 与 V_1 , 使

$$w = U_1 \begin{pmatrix} \mu_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \mu_m & \\ & & & 0 \end{pmatrix} V_1 \quad (10)$$

其中 $1 > \mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_m \geq 0$, μ_1^2, \dots, μ_m^2 为 $w\bar{w}'$ 之特征根. 以 (9)、(10) 两式代入 (8) 式即易得 $\lambda_j = \mu_j$ ($j=1, \dots, m$).

引理 2 设 $w = f(Z)$ 是 $R_{\mathbb{R}}$ 的保持原点不变的解析自同胚, 则点 Z 与象点 w 有相同的秩, 而 $Z\bar{Z}'$ 和相应的 $w\bar{w}'$ 有相同的特征根.

证 与引理 1 相似.

引理 3 (3) 式中所有 $A_{i,j}$ 之秩为 1.

证 任取 $z_{i,j} I_{i,j} \neq 0$ 而属于 $R_{\mathbb{R}}$, 则显然其秩为 1. 经变换 S 变为 $z_{i,j} A_{i,j}$, 由引理 1 得 $A_{i,j}$ 之秩为 1.

引理 4 (6) 式中 $B_{i,i}$ 之秩为 1, 而 $B_{i,j}$ 之秩 ($i \neq j$) 为 2.

证 任取 $z_{i,i} I_{i,i} \in R_{\mathbb{R}}$, 且不为 0, 其秩显然为 1, 经 S 变为 $z_{i,i} B_{i,i}$, 由引理 2 可知 $B_{i,i}$ 之秩也为 1. 再取 $z_{i,j} I_{i,j}$ ($i < j$) $\in R_{\mathbb{R}}$ 且不为 0, 其秩显然为 2. 经 S 变为 $z_{i,j} B_{i,j}$, 由引理 2 知 $B_{i,j}$ 之秩 2.

引理 5 在 (3) 式中, 当 $A_{1,1} = I_{1,1}$, $A_{1,2} = I_{1,2}$ 时, 对任意 $A_{j,1} = (a_{k,1})$ ($2 < j = 3, 4, \dots, n$) 及 $A_{j,1} = (b_{\alpha,\beta})$ ($j = 2, 3, \dots, m$),

有性质

$$1^\circ. \sum_{i=1}^n |a_{i,1}|^2 = 1; \quad 2^\circ. a_{k,1} = 0 \text{ (当 } k > 1 \text{ 时)};$$

$$3^\circ = \sum_{\alpha=1}^m |b_{\alpha,1}|^2 = 1; \quad 4^\circ. b_{\alpha,\beta} = 0 \text{ (当 } \beta > 1 \text{ 时)}.$$

证 由于 $A_{1,1} = I_{1,1}$, $A_{1,2} = I_{1,2}$, 故 A 为以下形式:

$$A = \begin{pmatrix} I^{(2)} & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix}$$

因而 $a_{1,1} = a_{1,2} = b_{1,1} = b_{1,2} = 0$. 取 $Z = z_1 I_{1,1} + z_2 I_{1,2} \in R_I$ 且不为 0, 经 (3) 变为点 $W = z_1 I_{1,1} + z_2 A_{1,l}$ ($j=3, 4, \dots, n$). 这时有

$$I - \bar{Z}Z' = \begin{pmatrix} 1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix}, \quad I - \bar{Z}'Z = \begin{pmatrix} 1 - |z_1|^2 & 0 & * \\ 0 & 1 & * \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$I - \bar{W}W' = \begin{pmatrix} 1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2 & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$I - \bar{W}'W = \begin{pmatrix} 1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2 & * & * \\ * & 1 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2 & * \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

以此代入 (8) 式. 比较第 (1,1) 第 (1,1) 列处的元素得 $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2)(1 - |z_2|^2)$

$$= (1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2) (1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2), \text{ 展开后即得 } \sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2 \delta$$

$$+ \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2 = 1, \quad \sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2 \cdot \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2 = 0. \text{ 比较第 (1,2) 行第 (1,2) 列处的元素得 } (1 -$$

$$|z_1|^2 - |z_2|^2) = \left((1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2) \left(1 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,2}|^2 \right) \right), \text{ 展开后得 } \sum_{i=2}^m |a_{i,2}|^2$$

$= 1$, 因此有 $\sum_{i=3}^n |a_{1,i}|^2 = 1$. 由于 A 为酉方阵, 因此, 当 $i > 1$ 时有 $a_{i,l} = 0$. 性质 1° 与 2° 得证.

取 $(z_1 I_{1,1} + z_2 I_{1,l}) \in R_I$ 且不为 0, 经 (3) 变为 $z_1 I_{1,1} + z_2 A_{1,l}$. 类似于上述步骤可得 3° 与 4°.

引理 6 在 (3) 式中, 当 $A_{1,j} = I_{1,j}$ ($j=1, 2, \dots, n$), $A_{l,1} = I_{l,1}$ ($j=1, 2, \dots, m$) 时, 对任意 $A_{i,l} = (a_{\alpha\beta})$ ($i=2, \dots, m; j=2, \dots, n$) 有 1°. $\sum_{l=2}^m |a_{i,l}|^2 = 1$; 2°. $a_{\alpha\beta} = 0$ (当 $\alpha \neq \beta$ 时).

证 此时 $A = \text{diag} [I^{(n)}, *^{(m-n)}]$. 而且 $a_{1,l} = 0$, $a_{i,1} = 0$ ($j=1, 2, \dots, n; l=1, 2, \dots, m$). 取 $Z = z_1 I_{1,1} + z_2 I_{1,l} \neq 0$, 但 $Z \in R_I$ ($i=2, \dots, m; j=2, \dots, n$); 则 Z 经 (3) 后变为 $W = z_1 I_{1,1} + z_2 A_{1,l}$ 而 $I - \bar{Z}Z' = \text{diag} [1 - |z_1|^2, *]$, $I - \bar{Z}'Z = \text{diag} [1 - |z_1|^2, I^{(l-2)}]$,

$I - |z_2|^2, I^{(n-1)}$. $I - \bar{W}W'$ 的 (1,1) 元素为 $(1 - |z_1|^2)$. $I - \bar{W}'W$ 的 (1,1) 处元素为 $(1 - |z_1|^2)$, (j, j) 处元素为 $(1 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,j}|^2)$. 以此代入 (8) 式并比较等式两端第 (1, j) 行第 (1, j) 列处的元素, 得到 $(1 - |z_1|^2)(1 - |z_2|^2) = (1 - |z_1|^2)(1 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,j}|^2)$. 因此, $\sum_{i=2}^m |a_{i,j}|^2 = 1$. 由于 A 为酉方阵, 故得性质 2°.

引理 7 在 (6) 式中当 $B_{11} = I_{11}$ 时, 对任意 $B_{ij} = (b_{\alpha\beta}) (j=2, \dots, p)$ 有性质 1°.

$$\sum_{i=2}^p |b_{i,j}|^2 = 1; \quad 2^\circ. \quad b_{i,j} = 0 \quad (i \neq 1).$$

证 此时 $B = \text{diag}[1, D]$, D 为 $\frac{1}{2}p(p+1) - 1$ 阶方阵, 而且 $\bar{D}'D = D\bar{D}' = I$. 取 $Z = z_1 I_{11} + z_2 I_{11} \in R_{\mathbb{R}}$, $z_2 \cdot z_1 \neq 0$, 则对应象点为 $W = z_1 I_{11} + z_2 B_{11}$. 而且 $I - \bar{Z}Z$ 与 $I - \bar{W}W$ 的 (1,1) 处的元素分别为 $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2)$ 与 $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^p |b_{1,i}|^2)$. 应满足 $[I - \bar{Z}Z] \times [I - \bar{Z}Z]_s = B[(I - \bar{W}W) \times (I - \bar{W}W)]_s \bar{B}'$. 比较此式两端第 (1,1) 行第 (1,1) 列处的元素得 $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2)^2 = (1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^p |b_{1,i}|^2)^2$. 因此得 $\sum_{i=2}^p |b_{1,i}|^2 = 1$, 此即性质 1°. 由于 B 为酉方阵, 故有 $b_{i,j} = 0 (i \neq 1)$, 此即性质 2°.

3 $R_{\mathbb{R}}(m, n)$ 的解析自同胚最大群

由 1.1 我们只要确定 $R_{\mathbb{R}}(m, n)$ 的原点的固定分群 G . 就行了. 我们有

定理 1 设 $S \in G_0$, 即 S 可写为

$$W = \sum z_{ij} A_{ij} \quad (11)$$

则存在常数酉方阵 U 和 V 使得 $UA_{ij}V = I_{ij} (i=1, \dots, m; j=1, \dots, n)$ 或者 (当 $m=n$ 时) $UA_{ij}V = I_{ij} (i=1, \dots, n; j=1, \dots, n)$.

证 1) 由引理 1 知 A_{11} 之秩为 1, 其特征根为 $1, 0, \dots, 0$. 所以存在酉方阵 U_{11}, V_{11} 使 $U_{11}A_{11}V_{11} = I_{11}$. 此时 (11) 式成为 $W^* = U_{11}WV_{11} = \sum z_{ij} U_{11}A_{ij}V_{11} = \sum z_{ij} A_{ij}^*$. 从我们的目的看, 不妨把 W^* 仍记为 W , A_{ij}^* 仍记为 A_{ij} . 而此时变换函数矩阵 A 变为 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix} = A^*$, B 为酉方阵. 同样记 A^* 为 A . 今后还要多次以酉方阵乘 (11) 式之两端. 因此约定此后提到 (11) 式, 总是指最近一次以酉方阵相乘以后的形式, 而且总以 A 记最近一次变换的函数矩阵. 至此, $A_{11} = I_{11}$.

2) 此时 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix}$, 而 $A_{12} = (a_{ij})$ 中 $a_{11} = 0$. 取 $Z = z_1 I_{11} + z_2 I_{12} \in R_{\mathbb{R}}$ 且 $z_1 \cdot z_2 \neq 0$. 经计算, 有 $I - \bar{Z}Z' = \text{diag}[1 - |z_1|^2 - |z_2|^2, I^{(n-1)}]$. $I - \bar{Z}'Z, I - \bar{W}W', I - \bar{W}'W$ 的

(1,1) 处的元素分别为 $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2)$, $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2)$, $(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2)$. 以此代入 (8) 式, 并比较两端第 (1,1) 行第 (1,1) 列处的元素得

$$(1 - |z_1|^2 - |z_2|^2)^2 = (1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2) (1 - |z_1|^2 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2).$$

后得 $\sum_{i=1}^n |a_{1i}|^2 + \sum_{i=1}^m |a_{1i}|^2 = 1$, $\sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2 \cdot \sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2 = 0$. 由于 A 为酉方阵, 故只可能有

两种情形: 1°. $\sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2 = 1$, $\sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2 = 0$, $a_{ki} = 0 (k \neq 1)$, 或者 2°. $\sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2 = 1$,

$\sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2 = 0$, $a_{ji} = 0 (j \neq 1)$. 当 $m \neq n$ 时 2° 不可能发生. 而 $m = n$ 时, 两者皆可发生. 然

而 2° 总可化为 1°. 事实上, 此时 $W = \sum_{i=1}^n z_{ij} A_{ij}$. 作 R_T 的解析自同胚 $W^* = W^{-1}$

$= \sum z_{ij} A'_{ij}$, A_{12} 变为 A'_{12} . 此即 1° 之情形. 因此不论 $m = n$ 或 $m \neq n$ 总可认为

$$A_{12} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=2}^n |a_{1i}|^2 = 1$$

作酉方阵

$$V_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \overline{a_{12}} & \\ 0 & \vdots & * \\ 0 & a_{12} & \end{pmatrix}$$

以此右乘 (11) 式 (指变化后的形式), 得 $A_{12} V_{12} = I_{12}$. 即 A_{11}, A_{12} 已分别变为 I_{11}, I_{12} .

3) 由引理 5, A_{12} 具有以下形式:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=2}^m |a_{1i}|^2 = 1$$

故存在酉方阵 U_{21} 使 $V_{21} A_{21} = I_{21}$, $U_{21} I_{11} = I_{11}$, $U_{21} I_{12} = I_{12}$.

此时, $A_{11} = I_{11}$, $A_{12} = I_{12}$, $A_{21} = I_{21}$, 再由引理 5 及 A 为酉方阵, 可知 A_{13} 而

$$= \begin{pmatrix} 0 & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=3}^n |a_{1i}|^2 = 1, \text{ 故存在酉方阵 } V_{13} \text{ 使得 } A_{13} V_{13} = I_{13}, I_{11} V_{13} = I_{11},$$

$I_{12} V_{13} = I_{12}, I_{21} V_{13} = I_{21}$, 如此下去. 一般 A_{1j} 化为 I_{1j} 后, 将 A_{1j} 化为 I_{1j} , 然后化

$A_{1,1+1}$, 为 $I_{1,1+1}$, 再化 $A_{1+1,1}$ 为 $I_{1+1,1}$, 最后可得 $A_{1,1} = I_{1,1}$ ($j=1, 2, \dots, m$), $A_{1,1} = I_{1,1}$ ($j=1, 2, \dots, n$).

4) 此时有 $A_{2,1} = e^{i\theta_{21}} I_{2,1}$ ($j=2, \dots, n$). 事实上, 由于 $A = \text{diag}[I^{(n+1)}, *^{(m-n-1)}]$, 取 $Z = z_1 I_{1,1} + z_2 I_{2,1} \in R_1$, $z_1, z_2 \neq 0$, 相应的象点 $W = z_1 I_{1,1} + z_2 A_{2,1}$, 再由引理 6 及 A 为酉方阵, 我们有

$$A_{2,1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{2,1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n,1} & 0 \end{pmatrix} \cdot \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2 = 1$$

而且 $I - \bar{Z}Z' = \text{diag}[(1 - |z_1|^2), (1 - |z_2|^2), I^{(m-2)}]$, $I - \bar{Z}'Z = \text{diag}[1 - |z_1|^2, I^{(j-2)},$

$1 - |z_2|^2, I^{(n-1)}]$. $I - \bar{W}'W = \text{diag}[1 - |z_1|^2, I^{(j-2)}, 1 - |z_2|^2 \sum_{i=2}^m |a_{i,1}|^2, I^{(n-1)}]$,

$$I - \bar{W}W' = \begin{bmatrix} 1 - |z_1|^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - |z_2 a_{2,1}|^2 & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}$$

以此代入 (8) 式并在两端比较第 $(2, j)$ 行第 $(2, j)$ 列处的元素得 $(1 - |z_2|^2) = (1 - |z_2 a_{2,1}|^2)$. 因此, $a_{2,1} = e^{i\theta_{21}}$ ($j=2, \dots, n$). 此即 $A_{2,1} = e^{i\theta_{21}} I_{2,1}$ ($j=2, \dots, n$). 同样可得 $A_{3,1} = e^{i\theta_{31}} I_{3,1}$ ($j=2, \dots, n$). 一般有 $A_{l,1} = e^{i\theta_{l1}} I_{l,1}$ ($l=2, \dots, m; j=2, \dots, n$).

5) 下面证明 $A_{1,1} = I_{1,1}$ ($i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n$). 事实上, 此时 $A = \text{diag}[I^{(n)}, 1, e^{i\theta_{22}}, \dots, e^{i\theta_{2n}}, 1, e^{i\theta_{32}}, \dots, e^{i\theta_{3n}}, \dots, 1, e^{i\theta_m}, \dots, e^{i\theta_{mn}}]$, 对 R_1 内任一点 $Z = (z_{\alpha\beta})$, 其对应象点为

$$W = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} & \dots & z_{1n} \\ \vdots & z_{kl} e^{i\theta_{kl}} & & \\ & & & \\ & & & z_{nn} \end{pmatrix}$$

这样就易计算出 $I - ZZ'$, $I - \bar{Z}'Z$ 和 $I - \bar{W}'W'$, $I - \bar{W}'W$ 的表达式. 应满足 $(I - \bar{Z}Z') \times (I - \bar{Z}'Z) = A[(I - \bar{W}'W') \times (I - \bar{W}'W)]A'$. 令 $Z(ij, kl), W(ij, kl)$ 分别表示上式左右两端第 (i, j) 行与第 (k, l) 列处的元素.

1°. 取 $z_{1,1} = 0$ ($i \neq 2$), $z_{1,1} = 0$ ($i \neq 2$), 由 $Z(11, 12) = W(11, 12)$ 得 $(1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,2}) = (1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,2} e^{i\theta_{22}})$, 即 $e^{i\theta_{22}} = 1$. 再由 $Z(11, 13) = W(11, 13)$ 得 $(1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,3}) = (1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,3} e^{i\theta_{23}})$, 即 $e^{i\theta_{23}} = 1$. 一般由 $Z(11, 1j) = W(11, 1j)$ 得 $(1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,j}) = (1 - |z_{1,2}|^2)(-\bar{z}_{2,1} z_{2,j} e^{i\theta_{2j}})$ 即有 $e^{i\theta_{2j}} = 1$ ($j=2, \dots, n$).

2°. 取 $z_{1,1} = 0$ ($l \neq j$), $z_{1,1} = 0$ ($l \neq j$). 由 $Z(11, 12) = W(11, 12)$ 得 $(1 - |z_{1,1}|^2)(-\bar{z}_{1,1} z_{1,2}) = (1 - |z_{1,1}|^2)(-\bar{z}_{1,1} z_{1,2} e^{i\theta_{12}})$, 即有 $e^{i\theta_{12}} = 1$. 一般由 $Z(11, 1l) = W(11, 1l)$ 得 $(1 - |z_{1,1}|^2)(-\bar{z}_{1,1} z_{1,l}) = (1 - |z_{1,1}|^2)(-\bar{z}_{1,1} z_{1,l} e^{i\theta_{1l}})$, 即有 $e^{i\theta_{1l}} = 1$ ($l=2, \dots, n$); 而 $j=2, \dots, m$. 故所有 $e^{i\theta_{1j}} = 1$. 也即 $A_{1,1} = I_{1,1}$. 此即 (11) 式经过一连串的酉线性变换后, 最后变为 $UWV = Z$ 或 $UWV = Z'$.

6) 定理证明之完成还待说明 2 中所说, 当 $m \neq n$ 时不可能有 $\sum_{i=1}^m |a_{i,1}|^2 = 1, a_{i,1} = 0$ ($k \neq 1$).

事实上,若如此,则存在酉方阵

$$U_{21} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \overline{a_{21}} & \cdots & \overline{a_{2n}} \\ 0 & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

使 $U_{21}A_{12} = I_{21}$. 此时可化为 A_{13} 为 I_{13} . 因若

$$A_{13} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & \dots & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

则重复 2) 的步骤, 仍可得 $\sum_{i=1}^n |a_{1i}|^2 + \sum_{i=1}^m |a_{i1}|^2 = 1$ 以及 $\sum_{i=1}^n |a_{1i}|^2 \cdot \sum_{i=1}^m |a_{i1}|^2 = 0$. 此时,

只可能 $\sum_{i=3}^m |a_{i1}|^2 = 1, a_{21} = 0 (l \neq 1)$. 不然, 取 $Z = z_{11}I_{11} + z_{12}I_{12} + z_{13}I_{13} \in R_I$,

($z_{11}, z_{12}, z_{13} \neq 0$) 其秩为 1, 但其象点 $W = z_{11}I_{11} + z_{12}I_{21} + z_{13}A_{13}$ 之秩显然不为 1, 与引理 1 矛盾. 故可取酉方阵 U_{13} , 使得 $U_{13}A_{13} = I_{31}, U_{13}I_{11} = I_{11}, U_{13}I_{21} = I_{21}$. 重复下步, 可化 A_{14} 为 I_{41} 直至化 A_{1m} 为 I_{m1} . 此即若 $A_{11} = I_{11}, A_{12} = I_{21}$, 则必存在酉方阵 U 使 $UA_{1j} = I_{j1} (j=1, \dots, m)$. 由于 $m < n$, 此时

$$A_{1n} = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \vdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{m2} & \vdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

取 $Z = z_1I_{11} + z_2I_{1n} \in R_I, z_1, z_2 \neq 0$, 对应象点 $W = z_1I_{11} + z_2A_{1n}$, 应满足 (8) 式. 比较

两端第 (1,1) 行第 (1,1) 列处元素得 $\sum_{i=1}^n |a_{1i}|^2 = 1$. 由于 A 为酉方阵, 故 $a_{1k} = 0 (k=1)$.

此时取 $Z = z_1I_{11} + z_2I_{12} + z_3I_{1n} \in R_I, z_1, z_2, z_3 \neq 0$, Z 的秩为 1, 但对象点 $W = z_1I_{11} + z_2I_{21} + z_3A_{1n}$ 的秩不为 1, 矛盾. 因此, 当 $m \neq n$ 时, A_{12} 不可能化为 I_{21} , 只能化为 I_{12} .

4 $R_{\mathbb{R}}(P)$ 的解析自同胚最大群

由于 1.1 我们只要确定 $R_{\mathbb{R}}$ 的在原点的固定分群 G_0 就行了. 我们有

定理 2 设 $S \in G_0$, 它可写为

$$W = \sum_{i < j=1}^p z_{ij} B_{ij} \quad (12)$$

则存在常数酉方阵 U 使得 $U' B_{ij} U = I_{ij} (i \leq j=1, \dots, p)$.

证 1) 由引理 4 可知 B_{11} 之秩为 1, 且 B_{11} 为对称方阵, 特征根为 1, $\dots, 0$. 因此

存在酉方阵 U_{11} , 使得 $U'_{11} B_{11} U_{11} = I_{11}$, 此时, $W^* = U'_{11} W U_{11} = \sum_{i < j=1}^p z_{ij} U'_{11} B_{ij} U_{11}$

$= \sum_{j < i=1}^p z_{ij} B_{ij}^*$. 与定理 1 一样, 我们仍记 W^* 为 W , B_{ij}^* 为 B_{ij} , 且作同样的约定.

2) 由引理 7, 我们有

$$B_{12} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{12} & & & \\ \vdots & & 0 & \\ b_{1p} & & & \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=2}^p |b_{1i}|^2 = 1$$

存在酉方阵 U_{12} 使 $U_{12}' B_{12} U_{12} = I_{12}$, $U_{12}' I_{11} U_{12} = I_{11}$. 即化 B_{12} 为 I_{12} . 由引理 7, 此时我们有

$$B_{13} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & b_{13} & \cdots & b_{1p} \\ 0 & & & & \\ b_{13} & & 0 & & \\ \vdots & & & & \\ b_{1p} & & & & \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=3}^p |b_{1i}|^2 = 1.$$

存在酉方阵 U_{13} 使得 $U_{13}' B_{13} U_{13} = I_{13}$, $U_{13}' I_{11} U_{13} = I_{11}$, $U_{13}' I_{12} U_{13} = I_{12}$. 即化 B_{13} 为 I_{13} . 如此下去, 可使 $B_{1j} = I_{1j}$ ($j=1, \dots, p$).

3) 下面证明 $B_{kl} = e^{i\theta_{kl}} I_{kl}$ ($1 < k \leq l = 2, \dots, p$). 此时

$$B = \begin{pmatrix} I^{(p)} & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix}, \quad \bar{D}' D = D \bar{D}' = I$$

因此

$$B_{kl} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & b_{p2} & \cdots & b_{pp} \end{pmatrix} = B'_{kl}$$

取 $Z = z_1 I_{11} + z_2 I_{kl} \in R_{\mathbb{H}}$, $z_1, z_2 \neq 0$, Z 的对应象点 $W = z_1 I_{11} + z_2 B_{kl}$. 它应满足 $[(I_{\mathbb{H}} \bar{Z} Z) \times (I - \bar{Z}' Z)]_s = B [(I - \bar{W} W) \times (I - \bar{W}' W)]_s B'$. 在两端比较对应元素可得即 $|b_{kl}|^2 = 1$. 即 $b_{kl} = e^{i\theta_{kl}}$, 即 $B_{kl} = e^{i\theta_{kl}} I_{kl}$.

4) 下面证明 $e^{i\theta_{kl}} = 1$. 此时

$$B = \text{diag} [I^{(p)}, e^{i\theta_{22}}, \dots, e^{i\theta_{pp}}, e^{i\theta_{33}}, \dots, e^{i\theta_{3p}}, \dots, e^{i\theta_{pp}}]$$

用 3 中的 5) 的相同方法, 利用 Bergman 度量方阵即可得 $e^{i\theta_{kl}} = 1$, 从而定理得证.

5 $R_{\mathbb{H}}(N)$ 的解析自同胚最大群

确定 $R_{\mathbb{H}}$ 的解析自同胚最大群是很容易的, 但为完备起见, 我们证之如下. 由 1.1 只要确定 $R_{\mathbb{H}}$ 的原点的固定分群 G_0 就行. 我们有

定理 3 设 $S \in G_0$, 它可写为 $w = zA$, 则 $A = e^{i\theta} D$. 其中 θ 为实数, D 为实正交方阵.

证 首先有引理, 若 z 为 $R_{\mathbb{H}}$ 之边界点, 则有 $z = e^{i\theta} (\lambda_1, i\lambda_2, 0, \dots, 0) \Gamma$, 其中 Γ 为 N 阶

实正交方阵, λ_1, λ_2 为实数, 且 $\lambda_1 \geq \lambda_2$ 满足 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$ 或 $\lambda_1 + \lambda_2 = \lambda$. 此引理见 [7].

由于 S 把 R_{IV} 的边界点映为边界点. 令 $A = (a_{\alpha\beta})$, 取 $z = (1, 0, \dots, 0)$ 为 R_{IV} 之边界点,

经 S 变为边界点 $W = (a_{11}, \dots, a_{1N})$. 此即 $1 + |WW'|^2 - 2W\bar{W}' = \left(\left| \sum_{i=1}^N a_{1i}^2 \right| - 1 \right) \left(\left| \sum_{i=1}^N a_{1i}^2 \right| \right.$

$\left. + 1 \right)$ 与 $(1 - |WW'|) = 1 - \left| \sum_{i=1}^N a_{1i}^2 \right|$ 至少有一式为零. 但此两式总是同时为零. 由引理得,

$W = (a_{11}, \dots, a_{1N}) = e^{i\theta_1} (\lambda_1, i\lambda_2, 0, \dots, 0) \Gamma$, 其中 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$, 否则 $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, 此时 $1 - |WW'| = 1 - (\lambda_1 - \lambda_2) = 2\lambda_2 \neq 0$, 矛盾. 此即 $(a_{11}, \dots, a_{1N}) = e^{i\theta_1} x_1, x_1 = (x_{11}, \dots, x_{1N})$ 为实向量, 而且 $x_1 x_1' = 1$.

同样可证 $(a_{11}, \dots, a_{1N}) = e^{i\theta_j} x_j, x_j = (x_{j1}, \dots, x_{jN})$ 为实向量, 而且 $x_j x_j' = 1 (j = 1, 2, \dots, N)$. 这样有

$$A = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} (x_{11}, \dots, x_{1N}) \\ e^{i\theta_2} (x_{21}, \dots, x_{2N}) \\ \dots \dots \dots \\ e^{i\theta_N} (x_{N1}, \dots, x_{NN}) \end{pmatrix}$$

由于变换 $w = zA'$ 也属于 G_0 , 因此同样可得到 $(e^{i\theta_1} x_{11}, e^{i\theta_2} x_{21}, \dots, e^{i\theta_N} x_{N1}) = e^{i\theta} y$, y 为实向量且 $yy' = 1$, 所以 $\theta_1 = \theta_2 = \dots = \theta_N = \theta$. 因此有

$$A = e^{i\theta} \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1N} \\ \dots & \dots & \dots \\ x_{N1} & \dots & x_{NN} \end{pmatrix} = e^{i\theta} D$$

由于 A 为酉方阵, 故 D 为实正交方阵.

参 考 文 献

- [1] Siegel, C. L., *Amer. J. Math.*, 65 (1943), 1—86.
- [2] Klingen, H., *Math. Anu.*, 129 (1955), 345—369.
- [3] Klingen, H., *Math. Ann.*, 132 (1956), 134—144.
- [4] Klingen, H., *Pacific J. Math.*, 10 (1960), 1327—1332.
- [5] 殷慰萍, 钟家庆, 北京大学学报 (自然科学版), 1962年第3期, 226—244.
- [6] Yin Weiping, *J. of China Univ. of Sci. & Tech.*, 16(1986), No. 2, 130—146.
- [7] 陆启铿, 典型流形与典型域, 上海科学技术出版社, 上海, 1963.
- [8] 陆启铿, 多复变数函数引论, 科学出版社, 北京, 1961.

On the Groups of Analytic Automorphisms of Cartan Domains

Yin Weiping

(Department of Mathematics)

Abstract

It is a very interesting and important problem to find out the full groups of analytic automorphisms of Cartan domains. For R_{II} , the problem was solved by C. L. Siegel firstly in 1943^[1]. For R_I , R_{III} with even order and R_{III} with odd order, the problems were solved by H. Klingenberg in 1955^[2], 1956^[3] and 1960^[4] respectively. The author and Zhong Jiaqing also solved the problem of R_{III} in 1962^[5]. The methods used on these papers are different from each other. Now, we show that the method of [5], which is mainly to make use of the Bergman metric matrix, can solve the problem for all of the Cartan domains.

Key words: automorphism, holomorphic mapping, groups of matrices.

A Simple and Convenient Approach for Numerical Simulation of Shock waves

Liu Ruxun

Wei Yong

(*Department of Mathematics*) (*Department of Modern Mechanics*)

Abstract

In the paper the quasi-characteristics method (abbr. QCM) is used for numerical simulating shock waves, and several quasi-characteristic schemes (abbr. QCS) are proposed for one dimensional and two dimensional hyperbolic conservation laws. Furthermore, the stability of these QCS is proved. The numerical results of several examples such as dam-failure, shock wave tube and Mach reflection problems have shown that the approach is simple, convenient and satisfactory.

Key words: numerical simulation, shock wave, quasi-characteristic method.

1 Introduction

The numerical simulation of the shock wave is of considerable important in fluid dynamic research. A lot of computational methods were utilized and developed, such as shock capturing method^[1-2], shock fitting method^[3-4], Harten method^[5-6], Random Choice method^[7-8] and FLIC^[9]. However, those methods generally are complex and burdensome (consumptive) for multidimensional problems.

The purpose of this paper is to propose a simple and convenient numerical simulation approach for various shock wave problems, i. e. the quasi-characteristic method (abbr. QCM). For one dimensional and two dimensional problems, several effective quasi-characteristic schemes (abbr. QCS) are proposed. In order to test the effect of the approach, the computed results for three conc-

rete examples are shown. These testing facts indicate that the QCS are satisfactory. The position, shape and thickness of shock waves are compared with the known results of other computed methods or experiments. Especially, the QCM have the following advantages: 1) The programming is simple; 2) the quantities of arithmetics and informations for computer are much less than above mentioned methods; 3) this approach has the good properties as upwind-type finite differential methods.

In section 2 we discuss the general governing equation system for the hyperbolic conservation laws, arrange the unknown dependent variables and transform the system to quasi-characteristics forms. In section 3, we propose the QCS for 1D and 2D shock wave propagation problem. In section 4, we discuss the stability of these QCS. Finally, in section 5, we show the numerical results of these testing examples—the dam-failure, shock wave tube and Mach wave reflection problems.

2 Mathematical Discussion of Governing Equations

1) One Dimensional Case

We consider one dimensional governing system for the conservation laws

$$U_t + (F(U))_x = H, \quad (x, t) \in \Omega \times T \quad (1)$$

or

$$U_t + A(U)U_x = H, \quad A(U) = \frac{\partial F(U)}{\partial U} \quad (2)$$

where x is the space independent variable, t is the time, U is the unknown function vector $U = (u_1, u_2, \dots, u_m)$, $F(U)$ is the flux vector $F(U) = (f_1(U), f_2(U), \dots, f_m(U))$, $A(U) = (a_{i,j}(U))_{m \times m}$ is the Jacobian matrix of the flux vector, and $H = H(x, t, U)$ is the right hand function vector, $H = (h_1, h_2, \dots, h_m)$, $h_i = h_i(x, U)$, $i = 1, 2, \dots, m$.

The system is hyperbolic type, i. e. $A(U)$ has m different real eigenvalues λ_l ($l = 1, \dots, m$), and there are m mutual independent left eigenvectors $W_l = (w_{l1}, w_{l2}, \dots, w_{lm})$ such that

$$W_l A = \lambda_l W_l, \quad (l = 1, 2, \dots, m) \quad (3)$$

Generally speaking, it is possible to choose an equivalent subset vector $V = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ of the unknown vector U , and

$$\frac{\partial U}{\partial V} = Q(V) \quad (4)$$

where $Q(V)$ is nonsingular in the solving domain $\Omega \times T$. Thus the equations (2) can be rewritten as

$$V_t + A^*(V)V_x = H^* \quad (5)$$

here

$$A^*(V) = Q^{-1}A(U)Q, \quad H^* = Q^{-1}H \quad (6)$$

and $A^*(V)$ has much better properties than $A(U)$. Clearly, the eigenvalues λ_i^* and the left eigenvectors of $A^*(U)$ are

$$\lambda_i^* = \lambda_i, \quad W_i^*(V) = W_i(U)Q, \quad (i=1, 2, \dots, m). \quad (7)$$

Multiplying equations (5) by W_i^* , we obtain the characteristic form

$$W_i^*(V_1 + \dots + V_m) = W_i^*H^*, \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (8)$$

which may also be written as the following ordinary differential equations system along the corresponding quasi-characteristic curves C_i ,

$$C_i: dx = \lambda_i^*(V)dt, \quad W_i^*dV|_{C_i} = W_i^*H^*dt|_{C_i}, \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (9)$$

Example 1 The governing equations of an unsteady inviscid compressible flow in one dimension written in conservation form are

$$U_t + (F(U))_x = H \quad (10)$$

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (e+p)u \end{bmatrix}, \quad H = -\frac{\alpha-1}{r} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ (e+p)u \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$e = \frac{p}{\gamma-1} + \frac{1}{2}u^2\rho \quad (11)$$

where ρ is the density, u is the velocity, p is the pressure, e is the total energy of unit volume, γ is the ratio of specific heats, and α equals 1, 2 or 3 according to plane, cylindrical or spherical flow respectively. If one chooses

$$V = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ p \end{bmatrix} \quad (12)$$

then

$$Q(V) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 \\ \frac{1}{2}u^2 & \rho u & \gamma-1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$A^* = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \rho a^2 & u \end{bmatrix}, \quad H^* = -\frac{\alpha-1}{r} \begin{bmatrix} \rho u \\ 0 \\ \gamma \rho u \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\lambda_i^* = u - a, \quad u, \quad u + a \quad (14)$$

$$W^* = \begin{bmatrix} W_1^* \\ W_2^* \\ W_3^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -\frac{1}{\rho a} \\ 1 & 0 & -\frac{1}{a^2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{\rho a} \end{bmatrix} \quad (15)$$

(where a is the local acoustic speed

$$a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \quad (16)$$

Example 2 The simple shallow water wave equations

$$U = \begin{bmatrix} uh \\ u \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} u^2 h + \frac{1}{2} gh^2 \\ uh \end{bmatrix}$$

$$H = \begin{bmatrix} -hR(u) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

where u , h , g and $R(u)$ are the water velocity, the depth, the gravity acceleration, and the fraction or slope term respectively. Suppose we elect

$$V = \begin{bmatrix} u \\ h \end{bmatrix} \quad (18)$$

(then

$$Q = \begin{bmatrix} h & u \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^* = \begin{bmatrix} u & g \\ h & u \end{bmatrix}, \quad H^* = - \begin{bmatrix} R(u) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

and

$$\lambda_{1,2}^* = u - \sqrt{gh}, \quad u + \sqrt{gh}. \quad (20)$$

$$W^* = \begin{bmatrix} W_1^* \\ W_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{h} & -\sqrt{g} \\ \sqrt{h} & \sqrt{g} \end{bmatrix} \quad (21)$$

2) Two Dimensional Case

Now we consider two dimensional problem

$$U_t + (F(U))_x + (G(U))_y = H, \quad (x, y, t) \in \Omega \times T \quad (22)$$

or

$$U_t + AU_x + BU_y = H, \quad A(U) = \frac{\partial F(U)}{\partial U}, \quad B(U) = \frac{\partial G(U)}{\partial U} \quad (23)$$

Similarly, $\lambda_l, W_l(A)$, ($l=1,2,\dots,m$) are the eigenvalues and left eigenvectors of the Jacobian matrix $A(U)$; $\mu_l, W_l(B)$, ($l=1,2,\dots,m$) are the eigenvalues and left eigenvectors of the Jacobian matrix $B(U)$ with respect to U , respectively.

$$W_l A = \lambda_l W_l, \quad W_l B = \mu_l W_l, \quad (l=1,2,\dots,m) \quad (24)$$

It is possible to choose an equivalent substitutive unknown vector V

$$V = (v_1, v_2, \dots, v_m)^T, \quad \frac{dU}{dV} = Q(V) \quad (25)$$

Thus equations (23) can be rewritten as

$$V_t + A^*(V)V_x + B^*(V)V_y = H^* \quad (26)$$

where

$$A^*(V) = Q^{-1}A(U)Q, \quad B^*(V) = Q^{-1}B(U)Q, \quad H^* = Q^{-1}H \quad (27)$$

$A^*(V)$ or $B^*(V)$ have much better properties than $A(U)$ or $B(U)$, and

$$\begin{aligned} \lambda_l^*(A^*) &= \lambda_l(A), \quad W_l^*(A^*) = W_l(A)Q \\ \mu_l^*(B^*) &= \mu_l(B), \quad W_l^*(B^*) = W_l(B)Q \end{aligned} \quad (28)$$

Definition 1 The curves c_l^* in the projective plane (x, t) (or projective plane (y, t))

$$c_l^*: \frac{dx}{dt} = \lambda_l(A) \quad \text{or} \quad \frac{dx}{ds} = \lambda_l(A), \quad \text{and} \quad \frac{dt}{ds} = 1 \quad (29a)$$

or

$$c_l^*: \frac{dy}{dt} = \mu_l(B) \quad \text{or} \quad \frac{dy}{ds} = \mu_l(B), \quad \text{and} \quad \frac{dt}{ds} = 1 \quad (29b)$$

are called quasi-characteristics (abbr. QCL) of the equations (26) on the projective plane (x, t) (or (y, t)).

Definition 2 Along c_l^* , the equations (23) may be transformed into the following 'ordinary-partial' differential equations

$$\begin{aligned} W_l^*(A^*)dV|_{c_l^*} &= W_l^*(A^*)(H^*(V) - (G^*(V))), dt|_{c_l^*}, \\ l &= 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (30a)$$

The equations (30a) are called the x -projective quasi-characteristics equations (abbr. x -projection QCE) of the equations (22) along the QCL c_l^* .

Similarly, the y -projective QCE along the QCL c_l^* are

$$\begin{aligned} W_l^*(B^*)dV|_{c_l^*} &= W_l^*(B^*)(H^*(V) - (F^*(V))), dt|_{c_l^*} \\ l &= 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (30b)$$

Definition 3 The QCE

$$W_l^*(A^*)dV|_{c_l^*} = 0, \quad l = 1, 2, \dots, m \quad (31a)$$

or

$$W_k^*(B^*)dV|_{c_k^*} = 0; \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (31b)$$

are called x -splitting QCE in the projective plane (x, t) or y -splitting QCE in the (y, t) .

Example 3 Two dimensional plane ($\alpha=2$) and three dimensional ($\alpha=3$) axisymmetric unsteady, inviscid gas flows can be described by the following conservation equation system

$$U_x + (F(U))_x + (G(U))_y = H(r, U) \quad (32)$$

where

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e+p)u \end{bmatrix}, \quad G(U) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (e+p)v \end{bmatrix}$$

$$\gamma^i (A^*) = n - v, n, n, n + v$$

$$H = -\frac{r}{c-2} \begin{bmatrix} \gamma^i p_u \\ 0 \\ 0 \\ p_u \end{bmatrix}$$

(37)

$$A^* = \begin{bmatrix} n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/p \end{bmatrix} = B^* \begin{bmatrix} v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/p \end{bmatrix}$$

and

$$\partial = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{d}{n} & \frac{d}{1} & 0 & 0 \\ -\frac{d}{v} & \frac{d}{1} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(\gamma - \lambda)(n^2 + v^2) & -v(\gamma - 1) & -n(\lambda - 1) & \gamma - 1 \end{bmatrix}$$

(36)

$$\partial = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & p & 0 & 0 \\ n & p & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(n^2 + v^2) & p v & \frac{\lambda - 1}{1} & \gamma - 1 \end{bmatrix}$$

then

(35)

$$V = \begin{bmatrix} p \\ v \\ n \\ p \end{bmatrix}$$

If we choose

sure and the total energy, respectively.

where p, n, v, p, e are the density, the r -velocity, the z -velocity, the pres-

(34)

$$e = \frac{\lambda - 1}{p} + \frac{1}{2} p (n^2 + v^2)$$

(33)

$$H(U) = -\frac{r}{c-2} \begin{bmatrix} p_u \\ p_u^z \\ p_u v \\ (e + p)n \end{bmatrix}$$

$$W^*(A^*) = \begin{pmatrix} W_1^*(A^*) \\ W_2^*(A^*) \\ W_3^*(A^*) \\ W_4^*(A^*) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{\rho a} \\ 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{a^2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{\rho a} \end{pmatrix} \quad (38)$$

$$\mu_i(B^*) = v - a, v, v, v + a.$$

$$W^*(B^*) = \begin{pmatrix} W_1^*(B^*) \\ W_2^*(B^*) \\ W_3^*(B^*) \\ W_4^*(B^*) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{\rho a} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{a^2} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{\rho a} \end{pmatrix} \quad (39)$$

3 The Quasi-Characteristics Schemes

Based on the quasi-characteristics form (9) and (29-31), we will propose several effective QCS.

1) One Dimensional Case

Let Δt , Δx be the time and space grid increments respectively, and $t_n = n\Delta t$, $x_l = j\Delta x$. We indicate the approximating solutions of the unknown $v(x, t)$ at the grid point (x_l, t_n) by v_l^n .

In the control cell Ω_i^n (Fig. 1), drawing the QCL c_l ($l=1, 2, \dots, m$) from the grid point (x_l, t_{n+1}) downwards to the time 'layer' $t = t_n$, we note the intersected point by x_{l1} ($l=1, 2, \dots, m$). Along c_l , we have the integral equations of the QCE (9)

$$\int_{(x_{l1}, t_n)}^{(x_l, t_{n+1})} dx = \int_{(x_{l1}, t_n)}^{(x_l, t_{n+1})} \lambda_l dt \quad (40)$$

$$\int_{(x_{l1}, t_n)}^{(x_l, t_{n+1})} W_l^* dV = \int_{(x_{l1}, t_n)}^{(x_l, t_{n+1})} W_l^* H^* dt \quad (41)$$

$(l=1, 2, \dots, m)$

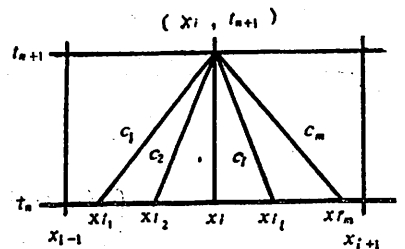


Fig. 1

If taking different numerical approximation for above integral equations, we may be able to get various QCS. For example, if we take a first order accurate, explicit approximation of the integrals (40) and (41), then have

$$x_l - x_{l1} = \lambda_l \Delta t \quad (42)$$

$$V(x_{l1}, t_n) = \delta_l V_{i+1}^n + (1 - \delta_l) V_l^n, \quad \delta_l = \frac{x_l - x_{l1}}{\Delta x} \quad (43)$$

$$\begin{aligned}
 \dot{s} &= -\text{sign}(\lambda_l(V_l^n)) \\
 W_l^*(V_{i,l}^n)V_{i,l}^{n+1} &= W_l^*(V_{i,l}^n) [V_{i,l}^n + H^*(V_{i,l}^n)\Delta t] \\
 l &= 1, 2, \dots, m; \quad i = 1, 2, \dots, m
 \end{aligned}
 \tag{44}$$

Form the linear equation system (41), we can solve the approximating values $V_{i,l}^{n+1}$ at the grid points (x_i, t_{n+1}) .

If second order accurate of the integral formulae (40), (41) is required, we can construct second order accurate QCS, or two-step QCS, i. e. the predictor-corrector schemes. If divided $[t_n, t_{n+1}]$ to two time intervals $[t_n, t_{n+1/2}]$ and $[t_{n+1/2}, t_{n+1}]$, according to the formulas of the equations (40) and (41), We may be obtain the fractional step QCS, and so on,

2) Two Dimensional Case

There are two sorts of QSC for two dimensional problems. The first is nonsplitting QCS, i. e. the projective schemes; the second is splitting QCS, i. e. the fractional step schemes.

A. Non-Splitting QCS

Based on the x -projective QCE (30), we consider the control cell $\Omega_i^n = [x_{i-1}, x_{i+1}] \times [t_n, t_{n+1}]$ on the projective plane (x, t) (Fig. 2). Similarly, we also have the first integrals of QCE along the QCL (29a).

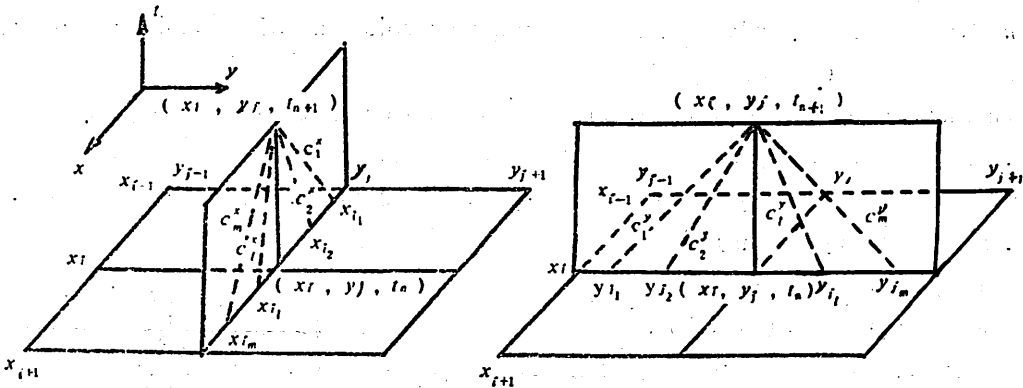


Fig. 2

$$\int_{(x_{i-1}, y_{j-1}, t_n)}^{(x_i, y_j, t_{n+1})} dx - \lambda_l(A^*)dt = 0
 \tag{45}$$

$$\int_{(x_{i-1}, y_{j-1}, t_n)}^{(x_i, y_j, t_{n+1})} W_l^*(A^*)dV - W_l^*[H^*(V) - (G^*(V))_s]dt = 0
 \tag{46}$$

$$l = 1, 2, \dots, m$$

The integrals (46) have the first order accurate schemes

$$x_i - x_{i-1} = \lambda_l(A_{i,l}^*)\Delta t, \quad \delta_l = \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta x}
 \tag{47}$$

$$V_{i,l}^n = \delta_l V_{i+l,l}^n + (1 - \delta_l) V_{i,l}^n, \quad s = -\text{sign}(\lambda_l(A_{i,l}^*))
 \tag{48}$$

$$W_l^*(A_{i,l}^n)V_{i,l}^{\tilde{n}+1} = W_l^*(A_{i,l}^n) \left[V_{i,l}^n + (H^*(V_{i,l}^n) - \frac{\partial}{\partial y}(G^*(V_{i,l}^n)))\Delta t \right] \quad (49)$$

$$i = 1, 2, \dots, m; \quad l = 1, 2, \dots, m$$

where $A_{i,l}^* = A^*(V_{i,l}^n)$. The finite difference equation system (49) is a linear algebra system. The unknown vector $V_{i,l}^{\tilde{n}+1}$ is the first order approximation of the unknown function vector V at grid point (x_i, y_l, t_{n+1}) . Where the right hand vector involves the first derivatives of $G^*(V)$ with respect to y , and they may be replaced by the central differential approximations.

$$\frac{\partial}{\partial y}(G^*(V))_{i,l}^n = [G^*(V_{i,l,n+1}) - G^*(V_{i,l,n-1})] / 2\Delta y \quad (50)$$

Let the operator P_x^n expresses above schemes (47—49), i. e.

$$V_{i,l}^{\tilde{n}+1} = P_x^n V_{i,l}^n$$

Similarly, according to y -projective QCE, we also have P_y^n

$$V_{i,l}^{\tilde{n}+1} = P_y^n V_{i,l}^n$$

Thus the averaging operator schemes

$$V_{i,l}^{\tilde{n}+1} = \frac{1}{2} (V_{i,l}^{\tilde{n}+1} + V_{i,l}^{\tilde{n}+1}) = \frac{1}{2} (P_x^n V_{i,l}^n + P_y^n V_{i,l}^n) \quad (53)$$

is called the non-splitting QCS.

B. Splitting QCS

Split the governing equations (26) into three equation systems

$$V_x + A^*(V)V_x = 0 \quad (54a)$$

$$V_y + B^*(V)V_y = 0 \quad (54b)$$

$$\frac{dV}{dt} = H^*(V) \quad (55)$$

The quasi-characteristics forms of the equations (54a) or (54b) are x -splitting QCE (31a) or y -splitting QCE (31b), then we also have the first integrals

$$\int_{(x_i, y_l, t_n)}^{(x_i, y_l, t_{n+1})} dx - \lambda_l(A^*)dt = 0 \quad (56a)$$

$$\int_{(x_i, y_l, t_n)}^{(x_i, y_l, t_{n+1})} W_l^*(A^*)dV = 0 \quad (57a)$$

for x -splitting QCE (31a) of the equations (54a). and

$$\int_{(x_i, y_{l,k}, t_{n+1})}^{(x_i, y_l, t_{n+1})} dy - \mu_k(B^*)dt = 0 \quad (56b)$$

$$\int_{(x_i, y_{l,k}, t_{n+1})}^{(x_i, y_l, t_{n+1})} W_k^*(B^*)dV = 0 \quad (57b)$$

for y -splitting QCE (31b) of the equations (54b). Therefore, we may build

Various splitting QCS for the systems (54), (55). For example, the first order multi-step explicit schemes are follows

(58a) $x_{i,t} - x_{i,t-1} = \lambda_i (A_{2n}^{i,t}) \Delta t$

(58a) $W_{n+1}^*(A_{2n}^{i,t}) V_{n+1}^{i,t} = W_n^*(A_{2n}^{i,t-1}) V_n^{i,t-1}, l = 1, 2, \dots, m$

(58b) $y_{i,t} - y_{i,t-1} = \mu_i (B_{2n+1}^{i,t}) \Delta t$

(58b) $W_n^*(B_{2n+1}^{i,t}) V_{n+1}^{i,t} = W_n^*(B_{2n+1}^{i,t-1}) V_n^{i,t-1}, k = 1, 2, \dots, m$

and

(59) $V_{n+1}^{i,t} = V_n^{i,t} + H^*(V_{n+1}^{i,t}) \Delta t$

Example 4 As the conservation laws (32), its splitting explicit QCS

are as follows

(a) Compute $V_n^{i,t}, a_{n+1}^{i,t}$

$\delta_l = |\lambda_l (A_{2n}^{i,t}) \Delta t| / \Delta x, s = -\text{sign}(\lambda_l (A_{2n}^{i,t}))$

(60) $V_n^{i,t+l} = \delta_l V_n^{i,t+l-1} + (1 - \delta_l) V_n^{i,t}, V_n^{i,t+l} = (p_{n+1}^{i,t}, u, \tilde{p}_{n+1}^{i,t})$

$a_{n+1}^{i,t} = \text{sort}(\lambda_l p_{n+1}^{i,t} / d_{n+1}^{i,t}), l = 1, 2, \dots, m$

(b) Compute $V_{n+1}^{i,t}, a_{n+1}^{i,t}$

$\tilde{p}_{n+1}^{i,t} = (n_{i,t+l} - n_{i,t} - \frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}} + \frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}}) / \left(\frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}} + \frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}} \right)$

(61) $\tilde{u}_{n+1}^{i,t} = u_{n+1}^{i,t} + (p_{n+1}^{i,t} - \tilde{p}_{n+1}^{i,t}) / (d_{n+1}^{i,t} a_{n+1}^{i,t})$

$\tilde{d}_{n+1}^{i,t} = d_{n+1}^{i,t} + (p_{n+1}^{i,t} - \tilde{p}_{n+1}^{i,t}) / (a_{n+1}^{i,t})$

$V_{n+1}^{i,t} = V_n^{i,t}$

(c) Compute $V_{n+1}^{i,t}, a_{n+1}^{i,t}$

(d) Compute $V_{n+1}^{i,t} = (p_{n+1}^{i,t}, u, \tilde{p}_{n+1}^{i,t})$

$\tilde{p}_{n+1}^{i,t} = (V_{n+1}^{i,t} - V_{n+1}^{i,t-1} - \tilde{d}_{n+1}^{i,t} p_{n+1}^{i,t} / d_{n+1}^{i,t} + \tilde{d}_{n+1}^{i,t} p_{n+1}^{i,t} / d_{n+1}^{i,t}) / \left(\frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}} + \frac{d_{n+1}^{i,t}}{d_{n+1}^{i,t}} \right)$

(62) $V_{n+1}^{i,t} = V_{n+1}^{i,t-1} + (p_{n+1}^{i,t} - \tilde{p}_{n+1}^{i,t}) / (d_{n+1}^{i,t} a_{n+1}^{i,t})$

$\tilde{u}_{n+1}^{i,t} = u_{n+1}^{i,t}$

$\tilde{d}_{n+1}^{i,t} = d_{n+1}^{i,t} + (p_{n+1}^{i,t} - \tilde{p}_{n+1}^{i,t}) / (a_{n+1}^{i,t})$

(e) Compute

$V_{n+1}^{i,t} = (p_{n+1}^{i,t}, u, \tilde{p}_{n+1}^{i,t})$

(63) $\Delta t \begin{pmatrix} \lambda \tilde{p}_{n+1}^{i,t} \\ 0 \\ 0 \\ nd \\ n+1 \end{pmatrix} \frac{\lambda}{\alpha - 2} - V_{n+1}^{i,t} = -V_{n+1}^{i,t-1}$

(63)

4 Discussion of the stability

It is of considerable difficulty to give a sufficient and stringent proof of the stability for above proposed QCS's. However, we are able to prove the stability for 2D-scalar equation. Consider simple conservation law.

$$u_t + (f(u))_x + (g(u))_y = 0 \quad (64)$$

or

$$u_t + a(u)u_x + b(u)u_y = 0 \quad (65)$$

$$a(u) = \frac{\partial f(u)}{\partial x}, \quad b(u) = \frac{\partial g(u)}{\partial y}$$

Clearly, its first order explicit splitting QCS may be written as

$$\delta_l = |a(u_{i,l}^n) \Delta t| / \Delta x, \quad s = -\text{sign}(a(u_{i,l}^n))$$

$$u_{i,l,l}^{n+1} = \delta_l u_{i+l,l}^n + (1 - \delta_l) u_{i,l}^n, \quad l=1 \quad (66)$$

$$\widetilde{u}_{i,l}^{n+1} = u_{i,l}^n$$

$$\delta_k = |b(u_{i,l}^{n+1}) \Delta t| / \Delta y, \quad s = -\text{sign}(b(u_{i,l}^{n+1}))$$

$$u_{i,l,k}^{n+1} = \delta_k \widetilde{u}_{i,l}^{n+1} + (1 - \delta_k) u_{i,l}^{n+1}, \quad k=1 \quad (67)$$

$$u_{i,l}^{n+1} = u_{i,l,k}^{n+1}$$

If supposing $a(u) > 0$, $b(u) > 0$, then the equivalent schemes of above schemes are the following upwind splitting schemes.

$$u_{i,l}^{n+1} = u_{i,l}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} a_{i,l}^n (u_{i,l}^n - u_{i-1,l}^n) \quad (68)$$

$$u_{i,l}^{n+1} = u_{i,l}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta y} b_{i,l}^{n+1} (u_{i,l}^{n+1} - u_{i,l-1}^{n+1}) \quad (68)$$

Its amplification factor of linearized Fourier stability analysis is

$$G(k, t) = (1 - B + B \cos(k_2 \Delta y) - i B \sin(k_2 \Delta y)) (1 - A + A \cos(k_1 \Delta x) - i A \sin(k_1 \Delta x)) \quad (69)$$

Where $B = \frac{\Delta t}{\Delta y} b$, $A = \frac{\Delta t}{\Delta x} a$, b are the stationary values of $a(u)$ and $b(u)$

respectively). Therefore the sufficient stability condition are

$$\Delta t \leq \min(|a(u_{i,l})| / \Delta x, |b(u_{i,l})| / \Delta y) \quad (70)$$

Generally speaking, the well-known CFL condition

$$\Delta t \leq \min(\max_{i,l} |\lambda_i(A_{i,l}^n)| / \Delta x, \max_{i,l} |\mu_k(B_{i,l}^{n+1})| / \Delta y) \quad (71)$$

may be considered as the sufficient stability condition for the explicit splitting QCS (58—59).

5 Numerical Results

The computational tests of some numerical examples are carried out. For

one dimensional case we take the Riemann condition^[7] as follows

$$U(x,0) = \begin{cases} U_L, & x < 0 \\ U_R, & x > 0 \end{cases} \quad (72)$$

A. The shock wave tube problem

For this problem, the equations (10—15) in example 1 can be used, where $H(U) = 0$ and Riemann condition is taken as Lax numerical condition^[8]

$$U_L = \begin{bmatrix} 0.445 \\ 0.311 \\ 8.928 \end{bmatrix}, \quad U_R = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.0 \\ 1.4275 \end{bmatrix} \quad (73)$$

B. The dam-failure problem

This problem was discussed in example 2 (Eqs. 17—21). We elect

$$H(U) = - \begin{bmatrix} R(U) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (74)$$

where $R(U) = g(s_0 - u^2 / (c^2 h))$, $s_0 = 0.0009$, $c = 40 \text{ m}^{1/2} / \text{s}$, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ and Riemann condition^[10]

$$U_L = \begin{bmatrix} 2.88 \\ 10.0 \end{bmatrix}, \quad U_R = \begin{bmatrix} 2.88 \\ 1.8 \end{bmatrix} \quad (75)$$

The numerical results was given in the paper^[11].

For two-dimensional cases, we simulate the following example.

C. The Mach reflection problem

The method which was discussed in example 3 can be used to solve Mach reflection that occurs when a plane-shock-wave passes a wedge. We select the Mach number as $M = 2.0$, the angle of the wedge $\alpha = 26.56^\circ$ and 35° ; the mesh increments are taken as $\Delta x = 0.136 \text{ cm}$, $\Delta y = \Delta x \text{tg} \alpha$. The positions and shapes of the shock waves at different times can be obtained. Fig. 3 and 4 show the isodense and isopiestic of the fluid field for different α . The results show the position and width of the Mach stick, the width and track of the reflective

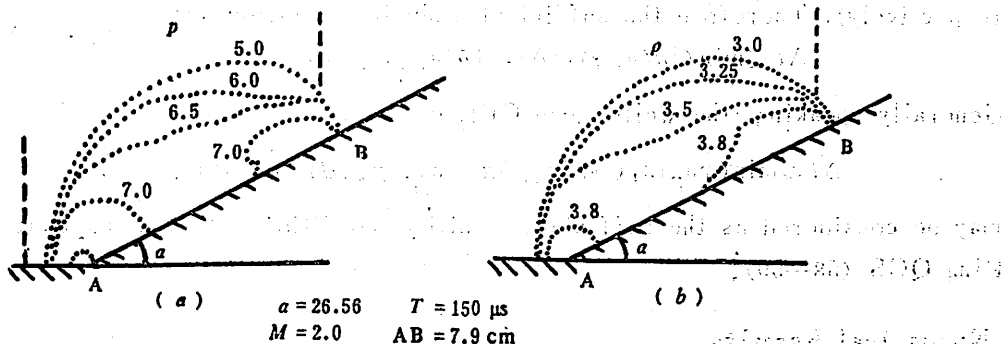


Fig. 3

shock wave and the distribution behind of the Mach wave which are comparable with the results obtained by the methods or experiments'°.

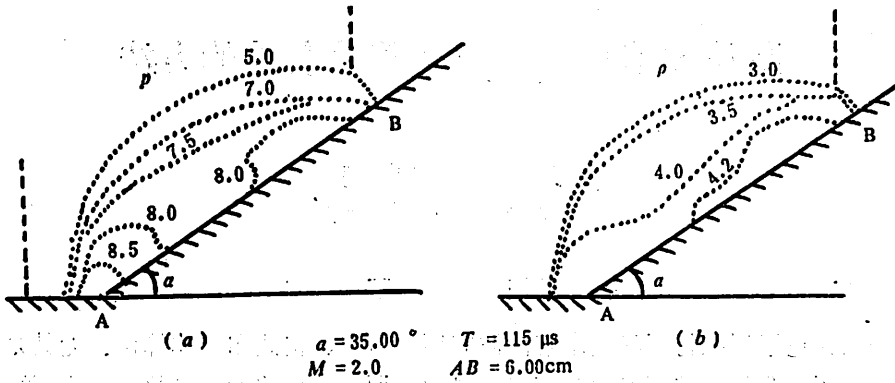


Fig. 4

References

- [1] Жуков, А. И., Применение метода характеристик к численному решению одномерных задач газовой динамики, Издательство академии наук, СССР, Москва, 1960.
- [2] Holt M., *Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, 1977, 80.
- [3] Mac Cormack R. W., Warming R. F., AGARD-LS-64, 1973.
- [4] Warming R. F., Kutler P., Lomax H., *AIAA J.*, 11 (1973), 189.
- [5] Harten A., *J. Comput. Phys.*, 49 (1983), 357.
- [6] Yee H. C., Warming R. F., Harten A., *J. Comput. Phys.*, 57 (1985), 327.
- [7] Chorin A. J., *J. Comput. Phys.*, 22 (1976), 517.
- [8] Sod G. A., *J. Comput. Phys.*, 27 (1978), 1.
- [9] Li Yinfan et al., *ACTA Mechanica Sinica*, 17 (1985), 262.
- [10] Marshall G., Menendez A. N., *J. Comput. Phys.*, 44 (1984), 167.
- [11] Liu Ruxun et al., *J. of CUST*, 16 (1986), 123.

激波数值模拟的一个简单有效的方法

刘儒勋
(数学系)

魏 勇
(近代力学系)

摘 要

本文全面讨论了用拟特征线法求解激波问题的方案、格式和具体算例。尤其是在本文中首次提出了采用分裂的拟特征线法计算多维激波问题的简便格式。其格式的简单、计算量的节省和程序实现的灵活多样是其它许多方法所没有的。最后以 Mach 反射为例做了实际计算, 所得结果与已有的成功结果相比也是满意的。

关键词: 数值模拟, 特征线, 激波。

Einstein 引力作为高维时空中 物质场的量子效应

莫厚俊 高怡泓

(基础物理中心)

摘 要

本文考虑高维时空中的诱导引力。高维时空中的物质场被看成是基本的。Einstein 引力及规范场则是由高维时空中物质场量子涨落的结果。以 $(4+N)$ 维共形理论出发给出了四维时空中的引力常数、宇宙学常数及规范耦合常数；它们与未紧化时空中物质场的量子行为有关。

关键词：引力理论，量子引力，诱导引力。

1 引言

在 Kaluza-Klein 理论 (K-K 理论)^[1] 及推广的 K-K 理论^[2] 中，几何被看成是基本的。从高维空间中的 Einstein-Yang-Mills 作用量出发，空间紧化自然地导致四维时空中的作用量。但空间紧化只有在物质场存在的情况下才能自然地给出^[3] (自发紧化)，并且在 K-K 及其推广理论中，物质场也不能由几何自然地导出。由此可见在 K-K 理论框架中“几何决定物质”似乎并不彻底。因此，也许物质场仍然是基本的，而 Einstein-Yang-Mills 理论是物质场的某种表现效应。一个自然的想法是把四维中的诱导力引推广到高维时空中去。

四维诱导引力理论的细节可见于 Zee^[4] 及 Adler^[5] 等人的文章。其基本思想是：Einstein 引力并不是基本的，它是物质场量子涨落的长波近似，因此引力常数及宇宙学常数可由物质场的量子涨落得出。Zee^[6] 和 Adler^[7] 给出的结果是：

$$\frac{1}{16\pi G_{4+d}} = \int dx x^2 \cdot \frac{i}{96} \langle \mathcal{S} \tilde{T}(x) \tilde{T}(0) \rangle.$$

其中 \mathcal{S} 表示编时乘积， $\tilde{T}(x)$ 是与物质场能-量动量张量有关的函数， $\langle \rangle$ 表示真空期望值。诱导引力不仅给出引力场与物质场的一种统一，而且可以解决传统量子引力中的重正化

困难。^[1]但是, 此时规范场的引入不如推广的K-K理论自然。

利用K-K理论来诱导 Einstein-Yang-Mills 理论的尝试可见于 Awada 等人的文章^[9]。它们从标度不变理论出发, 对场进行谐和展开后再考虑四维场的量子涨落, 得到了四维时空中的 Einstein-Yang-Mills 作用量其中引力常数、宇宙学常数及规范耦合常数由紧化空间的尺度给出。由量纲分析可知, 此时所给出的宇宙学常数大约是 $l_p^{-2} \sim 10^{65} \text{cm}^{-2}$ 的量级(太大)。

本文考虑从共形不变理论诱导出 Einstein-Yang-Mills 理论。我们假设诱导是由重场及较重场的量子涨落引起的, 即重场的量子涨落导出引力常数及宇宙学常数, 较重场量子涨落给出空间的紧化。这样, 所有的常数仅与物质场的量子涨落有关。结果发现, 所有常数来自诱导及紧化两方面的贡献。特别是对于宇宙学常数, 我们可以选择某些特定的维度, 使得诱导的贡献可能部分或全部地抵消仅由紧化的贡献所给出的巨大的值, 从而可能解决K-K理论中或推广的K-K理论中宇宙学常数过大的困难。

我们约定

$A, B, \dots = 1, 2, \dots, 4 + N$ 表示 $(4 + N)$ 一维空间坐标的指标,

$A', B', \dots = 1, 2, \dots, 4 + N$ 表示 $(4 + N)$ 一维的 Lorentz 指标,

$\mu, \nu, \dots = 1, 2, 3, 4$ 表示 4-维空间的指标,

$\alpha, \beta, \dots = 1, 2, 3, \dots, N$ 表示 N -维空间的指标, 并用“ \wedge ”和“ \sim ”分别标记 $(4 + N)$ 一维空间无指标量, 最后, 取

$$\text{diag}(\eta_{\mu\nu}) = (-1, 1, 1, 1)$$

基本拉氏量

假设基本作用量是共形不变的。 $(4 + N)$ -维共形不变理论可视为 $\text{SO}(4 + N, 2)$ 规范理论。规范场是: 与平移变换生成元 $(P_{A'})$ 对应的标架场 $e_{A'}^A$; 与 Lorentz 转动生成元 $(M_{A'B'})$ 对应的自旋联络场 $\omega_{A'B'}^A$; 与共形推动生成元 $(K_{A'})$ 和膨胀生成元 δ 对应的规范场 $f_{A'}^A, b_A$, 协变曲率张量(对重重指标求和)分别为

$$R_{AB}^{A'}(P) = \mathcal{D}_{[A} e_{B]}^{A'} \quad (1)$$

$$R_{AB}^{A'B'}(M) = \partial_{[A} \omega_{B]}^{A'B'} - \omega_{[A}^{A'C'} \omega_{B]}^{C'B'} - 2f_{[A}^{A'} e_{B]}^{B'} \quad (2)$$

$$R_{AB}(\delta) = \partial_{[A} b_{B]} - f_{[A}^{A'} e_{B]}^{A'} \quad (3)$$

$$R_{AB}^{A'}(K) = \mathcal{D}_{[A} f_{B]}^{A'} \quad (4)$$

其中 \mathcal{D}_A 为对 $(M), (D)$ 的协变微商, $[]$ 表示对其中的指标反称化。取一般约束条件

$$R_{AB}^{A'}(P) = 0 \quad (5)$$

$$R_{AB}^{A'B'}(M) e_{B'}^B = 0 \quad (6)$$

利用 Bianchi 恒等式, 可知所有规范场均可由曲率张量 $R_{AB}^{A'B'}(M)$ 给出。

下面考虑与物质场的耦合。设所有物质场均是共形推动 (K) 变换下的标量, 且 Wey 权重均为 w , 我们写出对物质场的协变微商

$$D_A \phi = \mathcal{D}_A \phi = (\partial_A - w b_A) \phi$$

(标量场)

$$D_A \chi = \mathcal{D}_A \chi = \left(\partial_A - \frac{1}{4} \omega_A^{A' B'} \Sigma_{A' B'} - w b_A \right) \chi \quad (\text{旋量场})$$

利用共形代数, 易知二次协变微商与 (K) 变换有关,

$$D_A D_{A'} \phi = (\partial_A - (w+1)b_A) D_{A'} \phi - \omega_A^{A' B'} D_{B'} \phi + w f_A^{A'} \phi \quad (7)$$

取 Weyl 权重

$$w = \frac{1}{2}(N+4-2) = \frac{1}{2}(N+2) \quad (8)$$

则 $\square \cdot \phi \equiv (D^{A'} D_{A'}) \phi$ 及 $\mathcal{D} \chi$ 是 (K) 不变的. 因此物质场的 Lagrangian 为

$$\begin{aligned} & \phi^* \square \cdot \phi && (\text{标量}) \\ & \bar{\chi} \mathcal{D} \chi && (\text{旋量}) \end{aligned}$$

引入标量场 ϕ 作为辅助场, 可得共形不变的拉氏量

$$\mathcal{L}_c = -\frac{8}{3} \frac{N+1}{N+2} \left[\mathbf{R}_{AB} \mathbf{R}^{AB} - \frac{4+N}{4(N+3)} \hat{R}^2 \right] \phi^{2N/(N+2)} - \phi^* \square \cdot \phi \quad (9)$$

其中 \mathbf{R}_{AB} , \hat{R} 分别是由 $\mathbf{R}_{A'B'}$ (M) 缩并成的 Ricci 张量及曲率标量.

因此基本拉氏量写成

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{grav}} + \mathcal{L}_{\text{matter}}^{(1)} + \mathcal{L}_{\text{matter}}^{(2)} \quad (10)$$

其中

$$\mathcal{L}_{\text{grav}} = \mathcal{L}_c$$

$$\mathcal{L}_{\text{matter}}^{(1)} = \text{重场的拉氏量 (其形式不重要)}$$

$$\mathcal{L}_{\text{matter}}^{(2)} = \text{较重场的拉氏量}$$

为确定起见将较重场的拉氏量取成

$$\mathcal{L}_{\text{matter}}^{(2)} = -\psi^* \square \cdot \psi + m \psi^* \psi \quad (11)$$

在此我们先引入质量项, 实际上它取可成零. 这并不与将 ψ 看成较重场矛盾, 较重场的含义是不存在这种场的外线.

3 四维有效作用量

下面考虑 $(4+N)$ 一维中重场与较重场的量子涨落给出的四维时空的有效作用量.

采用下述假设:

1) 在空间紧化之前, 重场的量子涨落给出 $(4+N)$ 一维空间中的引力常数 $\hat{G}_{i,d}$ 和宇宙学常数 $\hat{\Lambda}_{i,d}$.

2) 较重场的量子涨落给出空间的紧化.

这里重场及较重场是为了问题的简化而引入的, 事实上, 较重场或轻场的量子涨落也对 $\hat{G}_{i,d}$, $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 有贡献 (但存在它们的外线), 把这种贡献也归结为重场的量子涨落. 另一方面, 在量子涨落下, 一旦 $\hat{G}_{i,d}$ 的值不为零, 所有场的量子涨落对紧化均有贡献 (可由最后的结果看出). 上面的假设实际上意味着, 当 $\hat{G}_{i,d}$ 达到某一定值之后, 紧化才开始发生. 但 $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 在紧化前取值是必要的.

重场量子涨落给出的有效作用量为

$$\exp i S_{eff}^{(1)}[g^{AB}, \phi^{(2)}] = \left\{ \exp i \int d\hat{V} \mathcal{L}_{m_{eff}^{(2)}} \right\} \exp i I^{(1)} \quad (12)$$

$$\exp i I^{(1)} = \int D\{\phi^{(1)}\} \exp i \left[\int d\hat{V} \mathcal{L}_{\text{eff}} + \mathcal{L}_{m_{eff}^{(1)}} \right] \quad (13)$$

其中, $D\{\phi^{(1)}\}$ 表示对所有重场 (包括) 进行路径积分, $\{\phi^{(2)}\}$ 表示重场。

取 g^{AB} 的长波近似。可作这种近似的理由在于, 在维度紧化发生的尺度上, g^{AB} 的变化不大, 而接下去考虑维度紧化时, 这种假设是合理。这样, 可将 $I^{(1)}$ 按 $(\partial_A g_{BC})$ 的幂次展开, 且只保留前面非零的项

$$e^{i I^{(1)}} = \exp i \int d\hat{V} \left[\frac{1}{16\pi \hat{G}_{i_{nd}}} (-2\hat{\Lambda}_{i_{nd}}) + \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i_{nd}}} \hat{R} \right] \quad (14)$$

展式取此形式是显然的, 因为 $I^{(1)}$ 是标量, 而 $(\partial_A g_{BC})^2$ 这样的量构成的标量只能是 $\hat{R}^{(1)}$ 。由于在 $(\partial_A g_{AB})=0$ 点处 $I^{(1)}$ 取极值, 故展式中的一次项为零。在 6 中我们将由上列展式定出 $\hat{G}_{i_{nd}}$ 、 $\hat{\Lambda}_{i_{nd}}$, 这表明展开的形式的确是合理的。

由 (12)、(13)、(14)、得

$$S_{eff}^{(1)}[g^{AB}, \phi^{(2)}] = \int d\hat{V} \left(\mathcal{L}_{m_{eff}^{(2)}} + \hat{\mathcal{Q}}_A + \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i_{nd}}} \hat{R} \right) \quad (15)$$

$$\hat{\mathcal{Q}}_A = \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i_{nd}}} (-2\hat{\Lambda}_{i_{nd}}) = \text{const} \quad (16)$$

进一步考虑较重场的量子涨落对有效作用量的贡献

$$e^{i S_{eff}^{(1)}} = \int D\{\phi^{(2)}\} \exp i S_{eff}^{(1)}[g^{AB}, \phi^{(2)}] \quad (17)$$

对于方程 (11) 给出的场, 有

$$e^{i S_{eff}^{(1)}} = \exp i \left[\int d\hat{V} \left(\hat{\mathcal{Q}}_A + \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i_{nd}}} \hat{R} \right) \right] \exp i I^{(2)} \quad (18)$$

$$\exp i I^{(2)} = \int D\psi \exp i \left[\int d\hat{V} (g^{AB} \nabla_A \psi^* \nabla_B \psi - m^2 \psi^2) \right] \equiv \int D\psi \exp i S \quad (19)$$

为了得到紧化, 假设 $S_{eff}^{(1)}[g^{AB}]$ 所给出的时空度规的经典解具有下列形式^[11]

$$ds^2 = g^{AB} dX_A dX_B = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - [g_{\alpha\beta} (dy^\alpha - r dx^\alpha A_{\alpha}^{(a)} k_{(a)}^\beta(y))]^2 \quad (20)$$

其中 κ 是与耦合常数有关的常数且 $[\kappa] = -1$; 而 $k_{(a)}$ 是与变换群 G 的无穷小生成元相联系的 Killing 矢量。将 $\psi(x, y)$ 对紧化空间进行谐和展开, 分别以 $d\tilde{v}$ 、 dv 表示紧空间 (y -空间) 与四维时空 (x -空间) 的不变测度, 我们有

$$\psi(x, y) = \tilde{v}^{-1/2} \sum_n d_n^{-1/2} \psi^{(n)}(x) u^n D_n^{(n)}(L, y) \quad (21)$$

其中 $D_n^{(n)}(L, y)$ 是紧空间 G/H 的 d -维表示, 满足

$$\int d\tilde{v} \left[D_n^{(n)}(L, y) D_m^{(m)}(L, y) \right] = \tilde{v} d_n^{-1} \delta_{nm} \delta_{MN} \delta^{PQ} \quad (22)$$

注意到 $D_n^{(n)}(L, y)$ 是 G/H 上的标量, 且

$$k_{(a)}^{(m)} D_n^{(n)} = T_{(a)}^{(m)} D_n^{(n)} \quad (\text{对 } m \text{ 不求和}) \quad (23)$$

其中 $T^{(m)}_{(\alpha)}$ 是对应李代数的第 (α) 生成元的 m 维表示。

将 (21) 代入 (19)，利用 (20)、(22)、(23) 得

$$S = \sum_{\mu} \int d\nu [(D_{\mu} \psi)^* (D_{\nu} \psi) - M_{\mu\nu}^2 \psi^* \psi] \equiv \sum_{\mu} \int d\nu [-\psi^* A \psi] \quad (24)$$

其中 $A = D_{\mu} D_{\nu} + M_{\mu\nu}^2$ 。因此

$$\exp i I^{(2)} = \prod_{\mu} \int D \psi \exp(-i) \cdot \left[\int d\nu (\psi^* A \psi) \right] \quad (25)$$

(注意这里我们假定了 $\bar{D}(L, \nu)$ 不存在量子涨落)。单圈近似下的有效作用量可由 DeWitt-Schwinger 正时展开方法^[21] 得到。为此，我们将 $I^{(2)}$ 展成

$$I^{(2)} = -\frac{i}{2} \sum_{\mu} \int d\nu \int_0^{\infty} \frac{ds}{s} \exp(-isM_{\mu\nu}^2) \langle x, s | x, 0 \rangle \quad (26)$$

将其中的 $\langle x, s | x, 0 \rangle$ 作 Hadamard 展开

$$\langle x, s | x, 0 \rangle = i(4\pi is)^{-d/4} \sum_{l=0}^{\infty} a_l(x) (is)^l \quad (27)$$

式中的 d 是为了维度正规化而引入的量。由 (25) 中所给出的算符 A ，系数 a_l 的前几个值的计算结果是：

$$\begin{aligned} a_0 &= 2 \operatorname{tr} I \\ a_1 &= 2 \times \frac{1}{6} R \cdot \operatorname{tr} I \\ a_2 &= 2 \times \frac{1}{12} \operatorname{tr} (W_{\mu\nu} W^{\mu\nu}) \\ W_{\mu\nu} &= [D_{\mu}, D_{\nu}] \\ a_3 &= -2 \times \frac{1}{12} \kappa^2 d_{\alpha} d_{\beta}^{-1} \lambda_{\alpha} F_{\beta}^{(\alpha)} F^{(\beta)} \end{aligned} \quad (28)$$

d_{α} 为 G 的维度。代入 (26) (27) 得

$$\begin{aligned} I^{(2)} &= \int d\nu (\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3 + \dots) \\ \mathcal{L}_1 &= (4\pi)^{-2} \lim_{d \rightarrow 4} \Gamma(-d/2) \sum_{\mu} d_{\alpha} (M_{\mu}^2)^{d/2} \\ \mathcal{L}_2 &= (4\pi)^{-1} \cdot \frac{1}{6} R \lim_{d \rightarrow 4} \Gamma(1-d/2) \sum_{\mu} d_{\alpha} (M_{\mu}^2)^{d/2-1} \\ \mathcal{L}_3 &= (4\pi)^{-2} \cdot \left(-\frac{1}{12}\right) \kappa^2 F_{\beta}^{(\alpha)} F^{(\alpha)\beta} d_{\alpha}^{-1} \\ &\quad \times \lim_{d \rightarrow 4} \Gamma(2-d/2) \sum_{\mu} d_{\alpha} \lambda_{\alpha} (M_{\mu}^2)^{d/2-2} \end{aligned} \quad (29)$$

其中 λ_{α} 为 G/H 上的 Beltrami-Laplace 算符的本征值，其简并度为 d_{α} 。

(29) 式一般是发散的，必须解析延拓到物理区域使其正规化。这一过程将在下节中给

出。现设 $\mathcal{L}_A, \mathcal{L}_R, \mathcal{L}_{F^2}$ 已经正规化成为有限的，由 (18)、(29) 得

$$S_{, ,} [g^{AB}] = \int dV \left(\hat{\mathcal{L}}_A + \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i \dots d}} \hat{R} \right) + \int dV (\mathcal{L}_A + \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_{F^2}) \quad (30)$$

在度规取 (20) 式的情况下，(30) 右边第一项进一步约化为

$$\int dV \left(\hat{\mathcal{L}}_A + \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i \dots d}} \hat{R} \right) = \int dV (\mathcal{L}_A^{i \dots d} + \mathcal{L}_R^{i \dots d} + \mathcal{L}_{F^2}^{i \dots d}) \quad (31)$$

其中

$$\mathcal{L}_A^{i \dots d} = \tilde{v} \hat{\mathcal{L}}_A + \tilde{R} \tilde{v} / (16\pi\hat{G}_{i \dots d})$$

$$\mathcal{L}_R^{i \dots d} = \tilde{v} R / (16\pi\hat{G}_{i \dots d})$$

$$\mathcal{L}_{F^2}^{i \dots d} = -\frac{1}{4} \kappa^2 \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i \dots d}} F_{(\alpha)}^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^{(\alpha)}$$

这样我们得到四维时空中的有效作用量

$$S_{, ,} [g^{\mu\nu}, g^{a'b}] = \int dV [\bar{\mathcal{L}}_A + \bar{\mathcal{L}}_R + \bar{\mathcal{L}}_{F^2}] \quad (32)$$

其中的四维有效拉氏量为

$$\bar{\mathcal{L}}_A = \mathcal{L}_A^{i \dots d} + \mathcal{L}_A \equiv \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i \dots d}} (-2A_{i \dots d})$$

$$\bar{\mathcal{L}}_R = \mathcal{L}_R^{i \dots d} + \mathcal{L}_R \equiv \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i \dots d}} \cdot R \quad (33)$$

$$\bar{\mathcal{L}}_{F^2} = \mathcal{L}_{F^2}^{i \dots d} \equiv -\frac{1}{4} \kappa^2 F_{(\alpha)}^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^{(\alpha)}$$

因此我们进一步的任务是计算 $\mathcal{L}, \mathcal{L}_R, \mathcal{L}_{F^2}, \mathcal{L}_A^{i \dots d}, \mathcal{L}_R^{i \dots d}, \mathcal{L}_{F^2}^{i \dots d}$ 中出现的系数 (参见 (29))。

4 $\mathcal{L}_A, \mathcal{L}_R, \mathcal{L}_{F^2}$ 的系数及紧化空间尺度的计算

为简单计，取 $m=0$ 。本文只对 $G/H = S^N$ 的简单情形计算诸 \mathcal{L} (对于一般的对称空间，可利用 Selberg Trace Formula 来计算有效拉氏量)。 \mathcal{L}_A 的计算已在文献^[13]中给出

$$\mathcal{L}_A = 2C_N^{(0)} / \rho^2 \quad (34)$$

其中 ρ 是 S^N 的半径， $C_N^{(0)}$ 是常数，文献[13]中给出了在不同 N 下的 $C_N^{(0)}$ 数值结果。

利用类似的方法可计算 $\mathcal{L}_R, \mathcal{L}_{F^2}$ 的系数

$$I = \lim_{d \rightarrow 4} \Gamma(1-d/2) \sum_n a_n (M_n^2)^{d/2-1} \equiv \lim_{d \rightarrow 4} \tilde{I}$$

$$II = \lim_{d \rightarrow 4} \Gamma(2-d/2) \sum_n a_n \lambda_n (M_n^2)^{d/2-2} \equiv \lim_{d \rightarrow 4} \tilde{II}$$

$$\lambda_n = n(n+N-1) / \rho^2$$

$$a_n = (2n+N-1)(n+N-2) / (N-1) |n|$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{I} &= \Gamma(1-d/2) \sum_n a_n (M_n^2)^{d/2-1} \\
 &= \rho^{2-d} \Gamma(1-d/2) \sum_n \frac{(2n+N-1)\Gamma(n+N-1)}{\Gamma(N)n!} \cdot [n(n+N)]^{d/2-1} \\
 &= 2^{d/2} \sqrt{2\pi} \rho^{2-d} \frac{1}{(N-1)} \int_0^\infty dt t^{-N-d+1} f(t^2)
 \end{aligned} \quad (35)$$

其中 $f(t^2) = \left(\frac{t}{2\text{sh}t/2}\right)^{N-1} (bt)^{d/2+1/2} I_{-d/2-1/2}(bt)$, I_k 为变形 Bessel 函数。利用文献 [11] 中的延拓方法, $N+d = \text{odd}$ 时结果有限:

$$\tilde{I} = B_N^{(0)}/\rho^2, \quad B_N^{(0)} \equiv 2\sqrt{\pi} \frac{1}{(N-1)} \int_0^\infty \frac{dt}{t^4} \frac{(bt)^{5/2} I_{-5/2}(bt)}{(2\text{sh}t/2)^{N-1}} \quad (36)$$

回路积分路径 c 见图 (1)

由 \tilde{I} 的定义, $\tilde{II} = (1-d/2)\tilde{I}$, 因而

$$\tilde{II} = -B_N^{(0)}/\rho^2 \quad (37)$$

将这些结果代入 (29) 式, 即得规范化后的拉氏量

$$\mathcal{L}_A = 2(4\pi)^{-2} C_N^{(0)}/\rho^2 \quad (38)$$

$$\mathcal{L}_R = \frac{1}{6} (4\pi)^{-2} (B_N^{(0)}/\rho^2) \cdot R \quad (39)$$

$$\mathcal{L}_{F^2} = \frac{1}{12} (4\pi)^{-2} \kappa^2 d_G^{-1} (B_N^{(0)}/\rho^2) F_{\mu\nu}^{(\alpha)} F_{(\alpha)}^{\mu\nu} \quad (40)$$

因取 $G = \text{SO}(N+1)$, $H = \text{SO}(N)$, $G/H = S^N$, 故

$$d_G = N(N+1)/2.$$

下面计算紧致空间的大小。在长波近似下, g^{AB} 方程可由作用量 (30) 及变分原理得到, 这正是 $(4+N)$ 一维空间中的 Einstein 方程

$$R^{AB} - \frac{1}{2} g^{AB} (\hat{R} + \hat{\lambda}_{1,d}) = -8\pi \hat{G}_{1,d} T^{AB} \quad (41)$$

其中

$$T^{AB} = -\frac{2}{\sqrt{-g}} \delta I / \delta g_{AB}$$

$$I = \int dv (\mathcal{L}_A + \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_{F^2}) \equiv \int dv \mathcal{U} \quad (42)$$

为使问题简化, 在确定紧致空间大小时取

$$g^{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu}, \quad g_{\mu\epsilon} = 0$$

因此

$$R^{\mu\nu} = 0 = R^{\mu\epsilon}, \quad \hat{R} = R + \tilde{R} \quad (43)$$

方程 (41) 给出

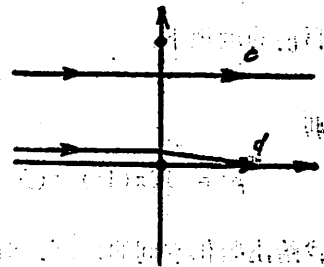


图 1

$$\begin{cases} \hat{R}^{\cdot b} - \frac{1}{2}g^{\cdot b}(\hat{R} + \hat{\Lambda}) = -8\pi\hat{G}_{i,d}T^{\cdot b} \\ \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}(\hat{R} + \hat{\Lambda}) = 8\pi\hat{G}_{i,d}T^{\mu\nu} \end{cases} \quad (44)$$

$$\frac{1}{2}\sqrt{\tilde{g}}T^{\cdot b} = -\delta I/\delta g_{\cdot b}$$

对于紧空间 S^N ,

$$R_{\cdot b} = -(N-1)\rho^{-2}g_{\cdot b}$$

由 (44) 可知

$$T^{\mu\nu} = B(\mathbf{y})\eta^{\mu\nu} \quad (45)$$

$$T^{\cdot b} = Ag^{\cdot b} \quad (46)$$

因而 (44) 式给出

$$\begin{cases} \frac{1}{2}[-N(N-1)/\rho^2 + \hat{\Lambda}_{i,d}] = 8\pi\hat{G}_{i,d}B(\mathbf{y}) \\ -(N-1)/\rho^2 - \frac{1}{2}[-N(N-1)/\rho^2 + \hat{\Lambda}_{i,d}] = -8\pi\hat{G}_{i,d}A \end{cases} \quad (47)$$

由 $T^{\cdot b}$ 的定义式知

$$\frac{1}{2}\sqrt{-\tilde{g}}Ag^{\cdot b} = -\delta I/\delta g_{\cdot b} = -\delta\mathcal{U}/\delta g_{\cdot b} \quad (48)$$

两端以 $g_{\cdot b}$ 缩并, 得

$$A = 2\rho^2\tilde{\nu}^{-1}N^{-1}d\mathcal{U}/d\rho^2 = \rho\tilde{\nu}^{-1}N^{-1}d\mathcal{U}/d\rho \quad (49)$$

同理由 $T^{\mu\nu}$ 的定义式,

$$B = \mathcal{U}/\tilde{\nu} \quad (50)$$

在目前的度规下,

$$\mathcal{U} = \mathcal{L}_N = 2(4\pi)^{-2}C_N^{(0)}/\rho^4$$

因而

$$\rho^2 = [16\pi(4\pi)^{-2}(N+4)C_N^{(0)}/N(N-1)] \frac{\hat{G}_{i,d}}{\tilde{\nu}} \quad (51)$$

此式给出紧化空间的尺度。对 S^N ,

$$\tilde{\nu} = \rho^N \alpha_N$$

其中 α_N 是与 N 有关的实常数; (51) 式给出

$$\rho^{N+2} = \kappa_N \hat{G}_{i,d}, \quad \kappa_N = 16\pi(4\pi)^{-2} \frac{N+4}{N(N-1)} \frac{C_N^{(0)}}{\alpha_N} \quad (52)$$

正如 3 中指出的那样, $\hat{G}_{i,d}$ 的值与紧化尺度有着密切的关系, 它必须在紧化前获值。

5 $\hat{G}_{i,d}$, $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 的计算

在 3 中我们曾经得到

$$\exp i \int d\mathcal{V} \left[\frac{1}{16\pi\hat{G}_{i,d}} (2\hat{\Lambda}_{i,d}) + \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i,d}} \hat{R} \right]$$

$$= \int D\{\phi^{(1)}\} \exp i [dV(\mathcal{L}_{\text{grav.}} + \mathcal{L}_{\text{matter}}^{(1)})] \quad (53)$$

记 $\bar{\mathcal{L}}^{(1)} = \sqrt{-\hat{g}}\mathcal{L}^{(1)}$, 它仅与 $\{\phi^{(1)}\}$, $\partial_c g_{AB}$, $\partial_c \partial_D g_{AB}$, g_{AB} 有关. 以 $2g_{AB}\delta/\delta g_{AB}$ 作用于 (53) 式两端,

$$\begin{aligned} & 2g_{AB} \frac{\delta}{\delta g_{AB}} \int d^{4+N} X \sqrt{-\hat{g}} \left[\frac{1}{16\pi\hat{G}_{i\pi d}} (\hat{R} - 2\hat{\Lambda}_{i\pi d}) \right] \\ &= \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}} \cdot 2g_{AB}(Z) \frac{\delta}{\delta g_{AB}} \int d^{4+N} X \bar{\mathcal{L}}^{(1)}}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}} [(\phi^{(1)}), g_{AB}]} \end{aligned} \quad (54)$$

其中 X, Z 表示 $(4+N)$ 维空间坐标, $S^{(1)} = \int dV \mathcal{L}^{(1)}$.

在高维空间中下列式子仍成立:

$$\delta \sqrt{-\hat{g}} = \frac{1}{2} \sqrt{-\hat{g}} g^{AB} \delta g_{AB}$$

$$\delta \sqrt{-\hat{g}} \hat{R} = -\sqrt{-\hat{g}} \left(\mathbf{R}^{AB} - \frac{1}{2} g^{AB} \hat{R} \right) \delta g_{AB} + \text{表面项}$$

$$\delta \bar{\mathcal{L}}^{(1)} = \frac{1}{2} \bar{T}^{AB} \delta g_{AB}$$

$$\bar{T}^{AB} \equiv \sqrt{-\hat{g}} T^{AB} = 2 \left[\frac{\partial \bar{\mathcal{L}}^{(1)}}{\partial g_{AB}} - \partial_D \frac{\partial \bar{\mathcal{L}}^{(1)}}{\partial (\partial_D g_{AB})} + \partial_D \partial_F \frac{\partial \bar{\mathcal{L}}^{(1)}}{\partial (\partial_D \partial_F g_{AB})} \right]$$

代入 (54) 有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{16\pi\hat{G}_{i\pi d}} \left[\left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hat{R}(0) - (4+N) \hat{\Lambda}_{i\pi d} \right] \\ &= \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}} [(\phi^{(1)}), g^{AB}] \cdot \hat{T} [g^{AB}, 0]}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}} [(\phi^{(1)}), g^{AB}]} \end{aligned} \quad (55)$$

其中 $\hat{T} = g_{AB} \bar{T}^{AB}$, 并在 $Z=0$ 处进行计算. 上式在 $g_{AB} \rightarrow \eta_{AB}$ 的情况下可写成

$$-\frac{4+N}{8\pi} \cdot \frac{\hat{\Lambda}_{i\pi d}}{\hat{G}_{i\pi d}} = \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}} [(\phi^{(1)}), \eta_{AB}] \hat{T}(0)}{\int D\{\phi\} e^{iS^{(1)}} [(\phi^{(1)}), \eta_{AB}]} \quad (56)$$

$$(\hat{T}(0) \equiv \hat{T}|_{g_{AB}=\eta_{AB}}).$$

为了求得 $1/16\pi\hat{G}_{i\pi d}$, 假设空间在 $X=0$ 处是共形平直的,

$$g_{AB}(X) = \eta_{AB} [1 - \beta R(0) X^2 + \dots]$$

($\beta = \text{const}$)

因而

$$\delta g_{AB} = -\eta_{AB} \beta R(0) X^2$$

另一方面我们有

$$\delta g_{AB} = -\eta_{AB} \beta \delta R(0) X^2$$

因此

$$\delta R(0) = R(0)$$

由 (55) 式,

$$\begin{aligned} \delta \left[\frac{1}{8\pi \hat{G}_{i,d}} \left\{ \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hat{R}(0) - (4+N) \hat{\Lambda}_{i,d} \right\} \right] &= \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i,d}} (N+2) \hat{R}(0) \\ &= \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]} \delta \hat{T}[g^{AB}, 0]}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]}} \\ &+ \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g]} \hat{T}(0) i \int d^{4+N} X \delta \mathcal{L}}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]}} \\ &+ \frac{\left[\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]} \hat{T}(0) \right] \left[\left(\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]} \right) \cdot i \int d^{4+N} X \delta \mathcal{L} \right]}{\left[\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, g^{AB}]} \right]^2} \end{aligned}$$

因为计算末了取 $g^{AB} \rightarrow \eta^{AB}$, 由 \hat{T}^{AB} 的表达式, 考虑到 $\mathcal{L}^{(1)}$ 在 $g^{AB} = \eta^{AB}$ 处取极值, 所以 $\delta \hat{T}$ 仅与 \hat{R}^2 及 $R^{AB} R_{AB}$ 的变分有关. 当 $g^{AB} \rightarrow \eta^{AB}$ 时它们显然为零. 因此在不考虑背景涨落的情况下 (57) 式第一项为零. 利用

$$\begin{aligned} i \int d^{4+N} X \delta \mathcal{L} &= \frac{i}{2} \int \bar{T}^{AB} \delta g_{AB} d^{4+N} X \\ &= -\frac{i\beta}{2} R(0) \int d^{4+N} X X^2 \hat{T}(X) \end{aligned}$$

可以得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{16\pi \hat{G}_{i,d}} &= -\frac{i}{N+2} \cdot \frac{\beta}{2} \int d^{4+N} X X^2 \left\{ \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]} \hat{T}(0) \hat{T}(X)}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]}} \right. \\ &\left. - \frac{\left[\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]} \right] \left[\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]} \tilde{T}(X) \right]}{\left[\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]} \right]^2} \right\} \quad (58) \end{aligned}$$

定义

$$\tilde{T}(X) = \hat{T}(X) - \frac{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]} T(X)}{\int D\{\phi^{(1)}\} e^{iS^{(1)}[\phi^{(1)}, \eta^{AB}]}} \quad (59)$$

于是 (57) 式可以写成

$$\frac{1}{16\pi\hat{G}_{i,d}} = -\frac{1}{N+2} \frac{\beta}{2} \int d^{4+N} X X^2 \langle \mathcal{S}(\tilde{T}(x)\tilde{T}(0)) \rangle. \quad (60)$$

\mathcal{S} 是编时算子, $\langle \rangle$ 表示真空期望值, 而 (56) 式则可写成

$$-\frac{4+N}{8\pi} \frac{\hat{\lambda}_{i,d}}{\hat{G}_{i,d}} = \langle \tilde{T}(0) \rangle. \quad (61)$$

当 $N+4=4$ ($N=0$) 时, 我们导出的结果 (60)、(61) 与四维时空中诱导引力的结果相一致。

6 结果与讨论

至此, 我们已经实现了以高维时空中物质场的量子涨落来诱导四维时空中的 Einstein-Yang-Mills 理论. 由 3 末尾的讨论得知, 四维时空中的有效引力常数 $G_{i,d}$ 及宇宙常数 $\Lambda_{i,d}$ 可以通过 $(4+N)$ -维空间中的相应常数 $\hat{G}_{i,d}$ 、 $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 计算出来 (参见 (33) 式). 在紧致空间 $G/H = S^N$ 的情况下,

$$\frac{1}{16\pi\hat{G}_{i,d}} = \frac{\tilde{\nu}}{16\pi\hat{G}_{i,d}} + \frac{(4\pi)^{-2}}{6} \frac{B_N^{(0)}}{\rho^2} \quad (62)$$

$$\frac{1}{16\pi\hat{G}_{i,d}} (-2\Lambda_{i,d}) = -\frac{1}{8\pi} \frac{\hat{\Lambda}_{i,d}}{\hat{G}_{i,d}} \tilde{\nu} - \frac{N(N-1)}{\rho^2} \frac{\tilde{\nu}}{16\pi\hat{G}_{i,d}} \quad (63)$$

$$\kappa^2 = \frac{\tilde{\nu}}{16\pi\hat{G}_{i,d}} - \frac{2}{3} \frac{(4\pi)^{-2}}{N(N+1)} \frac{B_N^{(0)}}{\rho^2} \quad (64)$$

因此全部问题归结为 (60)、(61) 的细致计算. 它们的计算依赖于高维量子场论, 然且这方面的确切知识目前尚少. 但有意义的是, 维度正规化过程提示我们, 在高维中有些发散可能被消除.

对于标量场, 有^[5]

$$\int_E d^{2\omega} P (P^2 + m^2)^{-\alpha} = \pi^\omega \frac{\Gamma(\alpha - \omega)}{\Gamma(\alpha)} (m^2)^{\omega - \alpha} \quad (65)$$

在通常的图计算中, 是整数, 故当 $2\omega = 4 + N = \text{odd}$ 时积分是有限的. 因此在高维中 $\hat{G}_{i,d}$ 、 $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 的行为可能相当好.

紧致空间的尺度应是 Planck 长度的量级, 故 (60) 式算出的 $\hat{G}_{i,d}$ 应该是 l_p^{N+2} 的量级, 从而由 (62) 式得到的 $G_{i,d}$, 即四维时空中诱导的有效引力常数的量级为 l_p^2 . 这与引力常数现在的值是吻合的.

由 (63) 式可知, $\Lambda_{i,d} \sim 1/l_p^2 \sim 10^{65} \text{ cm}^{-2}$. 这正是仅考虑推广 K-K 理论时遇到的宇宙学常数过大的困难的情形. 如果 $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 、 $\hat{G}_{i,d}$ 的符号相反, 并且 $\hat{\Lambda}_{i,d}$ 有较大的绝对值, $\Lambda_{i,d}$ 就会变小. 特别当

$$\hat{\Lambda}_{i,d} = -\frac{N(N-1)}{2\rho^2} \sim -\frac{1}{l_p^2} \quad (66)$$

时, 四维时空中的有效宇宙学常数 $\Lambda_{i,d} = 0$. 条件 (66) 可以通过高维场论的“微调” (Fine-Tuning) 而得到. 另外, (52) 式给出 $P^{N+2} = \kappa_N \hat{G}_{i,d}$, $\hat{G}_{i,d}$ 的符号应与 (也就是

与 $C_N^{(0)}$ 一致。Weinberg-Candelas 的数值计算结果表明, 对于 $N=1$ 到 21 的各种情况, 只有 $N=1, 21$ 时 $C_N^{(0)}$ 取负值。由 (61)、(66), 四维有效宇宙学常数为零的条件是

$$\langle \tilde{T}(0) \rangle_0 = \frac{1}{16\pi\hat{G}_{1,n,d}} \cdot \frac{N(N+4)(N-1)}{\rho^2} \sim M_p^{N+4} \quad (67)$$

其中 M_p 是 Planck 质量。这是一个非常大的正数。

目前仅有的具有量纲的基本量是 ρ , 故无量纲的耦合常数应与 ρ 无关, 事实上 $\kappa^2\rho^2$ 与 ρ^2 无关, 因而它代表规范耦合常数。规范耦合常数只有一个, 原因在于开始时我们只考虑了某一变换群的规范场。在对称性未破坏前, 只有一个规范耦合常数正是人们所希望的。但在对称性破缺后, 我们应该能够得到不同的耦合常数。一个直观的想法是紧空间的再紧化过程导致对称性破缺, 最后的时空基态具有下列形式:

$$R^4 \otimes G_1/H_1 \otimes G_2/H_2 \otimes \dots$$

前面已经提及, 实际过程是存在轻场 ϕ^L 的外线的, 也就是说过程中包括 ϕ^L 的产生及湮灭。因此在作用量中应引入 ϕ^L 的外源 J 。上面的讨论也没有包括背景的涨落, 这是不合理的, 因为: (1) 作用量原理对背景场的自然应用要求对背景量子化; (2) 规范场的量子化需要背景场的量子化; (3) 背景不量子化会导致与测不准原理相悖的结果。考虑了上述因素后, 我们可以得到一个改进的理论, 其中 Einstein-Yang-Mills 方程可以更自然地由作用量原理给出, 并且轻场也可自然地与规范场及引力场耦合。

参 考 文 献

- [1] For English translations of Kaluza's and Klein's original papers, see *Unified Field Theories of More Than 4 Dimensions* (Ed. by De Sabbata, V., Schmutzer, E.), World Scientific, Singapore, 1983, 427—446.
- [2] Witten, E., *Nucl. Phys.*, **B186** (1981), 412.
- [3] Scherk, J., *Phys. Lett.*, **57B** (1975), 463.
- [4] Zee, A., *Unity of Forces in the Universe* (Ed. by Zee, A.), World Scientific, Singapore, 1982, 1062—1076.
- [5] Adler, S., *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982), 729.
- [6] Zee, A., *Phys. Rev.*, **D23** (1981), 858.
- [7] Adler, S., *Phys. Lett.*, **958B** (1980), 241.
- [8] Stelle, K., *Phys. Rev.*, **D16** (1977), 953.
- [9] Awada, M., Toms, D., *Phys. Lett.*, **135B** (1984), 283.
- [10] Weinberg, S., *Gravitation and Cosmology*, John Wiley, 1972, 155.
- [11] Salam, A., Strathdee, J., *Ann. Phys.*, **141** (1982), 316.
- [12] Hurt, N., *Geometric Quantization in Action*, D. Reidel Publishing Company, Holland, (1983), 32.
- [13] Candelas, P., Weinberg, S., *Nucl. Phys.*, **B273** (1984), 397.

Einstein Gravitation as Quantum Effect of Matter Fields in High Dimensional Space-Time

Mo Houjun, Gao Yihong

(Center for Fundamental Physics)

Abstract

Induced gravity is considered in high dimensional spacetime. Matter fields in high dimensional space-time are taken to be fundamental while Einstein theory and gauge fields are thought to be the effects of quantum fluctuations of matter fields. The gravitational constant, cosmological constant and gauge coupling constant are calculated from $4+N$ -dimensional conformal theory. They all depend on the quantum behaviors of matter fields in uncompactified spacetime.

Key words, gravitation theory, quantum gravity, induced gravity.

用光电化学方法研究硫酸溶液 内铅电极上钝化膜一些性质

杭 瑚

(中国科学技术大学)

D. S. Nadezhdin

R. G. Barradas

(加拿大卡尔顿大学)

摘 要

硫酸溶液内的铅电极被阳极极化以后, 随即进行负向电位扫描, 同时记录下线性扫描伏安曲线和相应的扫描电位—光电流曲线。实验表明, 在钝化膜厚度较小的情况下, 光电流的峰值与钝化膜中 PbO 的数量成正比。计算出 PbO 层的 pH 值为 9 左右, 进一步肯定了关于硫酸溶液内铅表面上钝化膜的“碱化”理论模型。

关键词: 光电化学方法, 硫酸溶液, 铅电极, 钝化膜。

1 前言

作为基本的二次化学电源, 铅酸蓄电池虽已有 120 多年的历史, 但其充放电过程中的电化行为以及相应的组成结构变化至今并未被完全了解。鉴于传统的基本研究手段——电化学方法有一定局限性, 近年来发展了 X—光衍射、激光喇曼光谱以及光电化学等研究方法, 它们可以对铅电极上相组成的变化提供更多的信息。

一些作者对铅电极上钝化膜中 PbO 的光电化学特性作过研究^[1-4]。 $Pb/PbO/PbSO_4/H_2SO_4$ 电极在可见光波长范围内具有光活性, 光敏阈值约 450nm 左右^[2], 且此光活性仅当铅电极在 0—1V (相对于 Hg/Hg_2SO_4 参比电极) 范围内进行阳极极化以后才能发生^[1]。

至于 PbO 在铅电极的钝化膜中存在的介质条件, Ruetschi 等人提出和发展了“碱化”理论^[5,6,11], 认为外表面透光性的多孔 $PbSO_4$ 层对电解质溶液具有半透膜性质。考虑到膜扩散电势, 钝化膜内层的 PbO 所处的 pH 值为 9.34^[5]。

1986年1月13日收到。

本研究工作的目的在于用光电化学方法探求钝化膜中 PbO 存在的实际 pH 条件, 并且找出钝化膜的光电响应与 PbO 存在量之间的关系。

2 实验

在三电极电解池中, 以纯铅 (99.997% Pb, Cominco of Canada Ltd.) 制成的工作电极嵌入 Scotchcast 树脂内, 露出表面的面积为 0.04cm^2 ; 以铂片作对电极, 参比电极则是 $\text{Hg}/\text{Hg}_2\text{SO}_4/30\%\text{H}_2\text{SO}_4$ 。本文中所有电位数值 (除特别注明者外) 都是相对于这个参比电极测得的。实验温度为 $22 \pm 0.5\text{ }^\circ\text{C}$ 。

实验前, 工作电极要预先用超微切片机以玻璃刀刀将电极端面的薄层铅连同它周围的树脂一起切割掉, 露出新鲜的纯铅表面, 用三次蒸馏水冲洗两次后再插入电解池。

电解液是用三次蒸馏水配制的 $30\%\text{H}_2\text{SO}_4$ (Aristar) 溶液, 约 150ml, 每次实验前预先以纯氮脱氧, 进入电解池与电极接触以后, 立即通电使工作电极在 -1.2V 下还原直至还原电流小于 $0.5\mu\text{A}$ 。信号发生和电位控制分别用 E.G. & G. PARC (Model 175) 通用信号发生器和 Stonehart (Model BC 1200) 恒电位仪; 极化电流以及线性扫描的记录则分别用 Fisher Recordall (Series 500) 记录仪和 Hewlett Packard (Model 7035) X—Y 记录仪。

对电极进行光照的光源是 1 kW 的氙—汞灯 (Oriel Optics Corporation, Model C—60—60), 光线依次通过红外滤光器 (2% 的 CuSO_4 水溶液)、Jarrel—Ash 单色器 (Fisher Scientific Co.)、E. G. & G. PARC 斩光器 (Model 194A) 和聚焦透镜, 照射到电解池的光学玻璃窗口上。

光的波长选定为 435nm, 斩光器转动频率为 75Hz, 光强约 $10\text{mW}/\text{cm}^2$ 。电极产生的光电流经 E. G. & G. PARC 锁定放大器 (Model 128A) 放大以后, 以另一台 Hewlett Packard (Model 7035) X—Y 记录仪记录之。

负方向线性电位扫描总是紧接在电极被阳极极化某一定时间以后。每次测定完毕都令工作电极处于 -1.2V 还原电位, 直至还原电流小于 $0.5\mu\text{A}$ 以后才开始下一次极化以及随后进行的线性电位扫描。

3 结果与讨论

3.1 铅电极上钝化膜的光电响应

图 1 例举了电极在两个不同的极化电位下经历阳极极化以后作负方向电位扫描时, 记录下的线性扫描伏安曲线 (LSV) 和相应的扫描电位—光电流曲线。已知 LSV 中两个还原峰分属于 PbO 和 PbSO_4 [5, 7]。

光电流的负值部分具有和 LSV 中 PbO 还原峰对应一致的关系: 峰值电位是一致的, 又都同时终止于 PbSO_4 还原峰 (LSV 中) 出现之前。而且, 两者的峰电流具有相同的变化趋势, 当阳极极化电位至 -0.2V 左右时, LSV 中的 PbO 还原峰及对应的光电流峰同时消失 (图 2)。根据这些事实, 我们可以充分肯定铅电极钝化膜的光电响应源自 PbO 层, PbO 的数量有可能用光电流值的大小来表征。

值得提出的是如下事实: PbO 的光电流峰在下降到接近根部时 (约 -0.9V), 被一峰

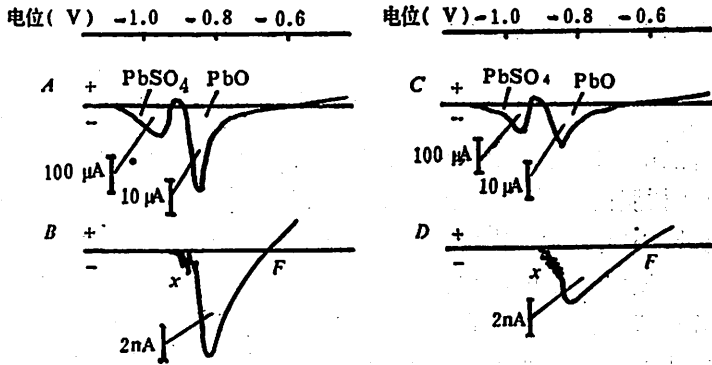


图 1 铅电极上的 LSV 曲线 (A, C) 和相应的扫描电位—光电流曲线 (B, D)
 扫描速度: 2mV/s;
 扫描前的阳极极化时间: 20min;
 极化电位: 0.8V (A, B); 0.4V (C, D)。

值在 1 nA 左右的小峰 (图 1 B、D 中的 x) 所迭加。即使电极钝化时的极化电位比较负, 例如 -0.4V, 以至 PbO 还原峰 (LSV 中) 和 PbO 的光电流峰根本不出现, 该未知小峰仍然存在, 它究竟来源于微量杂质或碱式硫酸铅或其它因素, 有待以后研究, 但该 x 峰对 PbO 光电流峰值的测量没有干扰。

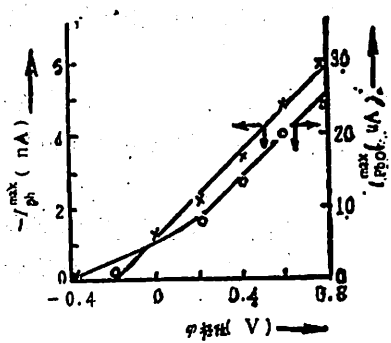


图 2 铅电极在光照下负向扫描时产生的光电流以及 PbO 还原电流的峰值与扫描前阳极极化电位之间的关系
 扫描速度: 2mV/s; 阳极极化时间: 20min。

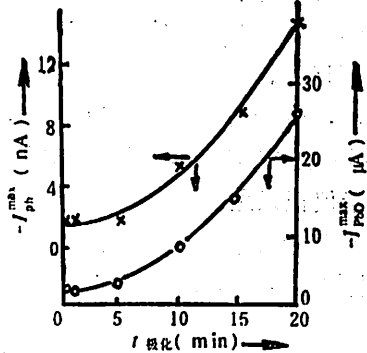


图 3 铅电极在光照下负向扫描时产生的光电流以及还原电流的峰值与扫描前阳极极化时间之间的关系
 扫描速度: 2mV/s;
 阳极极化电位: 0.6V。

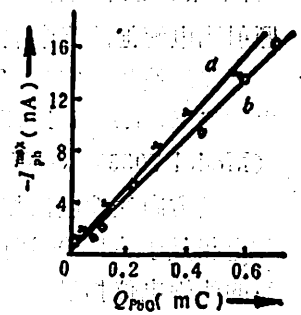


图 4 铅电极在光照负向扫描时产生的光电流峰值与电极上 PbO 的数量 (此处以 Q_{PbO} 表示) 之间的关系
 扫描速度: 2mV/s;
 阳极极化电位: a) 0.2V, b) 0.6V。

电极在钝化时的极化电位较正, 则钝化膜内生成的 PbO 较多^[7], 光电响应也就比较显著。图 2 表明, 在一定条件下, 峰值光电流 (I_{ph}^{max}) 与阳极极化电位 $\varphi_{极化}$ 有粗略的线性关系。LSV 中 PbO 还原电流的峰值 (I_{PbO}^{max}) 也有相似的变化趋势。另一方面, 如果固定极化电位, 改变极化时间 $t_{极化}$, 则随着 $t_{极化}$ 增长, 电极表面钝化膜厚度增大, PbO 数量增多, I_{ph}^{max} 和 I_{PbO}^{max} 也同样增大, 两者有相同的变化趋势 (图 3)。

图4进一步给出定量关系,其横坐标是 Q_{PbO} -LSV中PbO还原峰下的面积所代表的电量,它正比于阳极极化后电极上生成的PbO数量^[7]。 $I_{PbO}^{max} \sim Q_{PbO}$ 呈一直线关系,表明在阳极极化时通过电量不多(不超过 $10\text{mC}/\text{cm}^2$),亦即钝化膜厚度不大的情况下,光电流的峰值与钝化膜中PbO的数量成正比。钝化时极化电位数值的大小对直线斜率可能略有影响,因为在不同的极化电位下生成同样数量的PbO的同时,生成的 $PbSO_4$ 的数量并不相同^[7],因此实际投射到PbO层的光强会有所差别。

应当指出,电极的预处理和溶液中的微量杂质对电极表面的状态关系极大,从而对电极的电化学行为以及生成的钝化膜的光电响应有重要影响。因此,本文中每一组实验都是一次完成的——不更换电极与溶液,且实验时间不可延续太长。每组实验重复2~3次以确证各试验因子间的关系,至于光电流的绝对数值则很少能重复。

3.2 用近似的平带电位实验值估算钝化膜内PbO层的pH值

从图1还可看出,在负向电位扫描过程中正向光电流逐渐变小,过某一F点以后变为负向光电流。该F点的电位 $V_{(I_{PbO}=0)}$ 在本研究工作范围内为定值(见下表),不随先前电极钝化时的极化电位($\phi_{极化}$)的不同而改变。

$\phi_{极化} (V)$	-0.4	-0.2	0	0.2	0.4	0.6	0.8
$-V_{(I_{PbO}=0)} (V)$	—	—	0.65	0.67	0.62	0.65	0.67
			± 0.02	± 0.02	± 0.01	± 0.01	± 0.02

注:电极极化时间均为20min,零光电流电位 $V_{(I_{PbO}=0)}$ 的数值为三次实验的平均值。

对于光电流改变符号可能有两种解释:

- 1) 氧化膜的半导体性质有了改变,从n型变为p型;
- 2) 氧化膜内电场方向发生了逆转。

文献[4]表明,对于跟 $PbSO_4$ 层的微孔内的硫酸溶液相接触的PbO来说,光电流方向的转变是由于PbO层内电场方向的倒转,其机理可示意于图5^[4]。

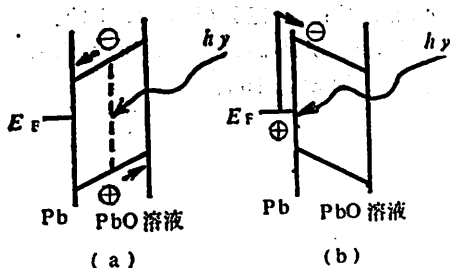


图5 PbO层内光电流产生机理的示意图

- a) PbO层内的光激发;
- b) 从金属Pb向PbO层的光电发射。图中 E_F 是费米能级。

据此,我们有理由认为,对于本研究体系,PbO的上述零光电流电位 $V_{(I_{PbO}=0)} \approx V_{i,b}$, $V_{i,b}$ 是PbO的平带电位。

Hardee与Bard^[9]曾给出pH=9的条件下PbO的 $V'_{i,b} = -0.3V$ (对饱和甘汞电极)。对于 $Hg/Hg_2SO_4/30\%H_2SO_4$ 参比电极而言,此值应为

$$V''_{i,b} = -0.3 + 0.244 - 0.626 \approx -0.7(V),$$

而 $qV_{i,b} = E_c^0 - \mu + B - 2.3kT(\text{pH})$ ^[9] (1) 式中 q 为电子电荷, E_c^0 为PbO的表面导带能级, μ 为PbO本体导带能级与费米能级之差, B 为常数, k 为波兹曼常数, T 为绝对温度。

对于一定的体系, $E_c^0 - \mu + B = A = \text{常数}$,而 $T = 273 + 22 = 295(K)$,于是式(1)可

简化为

$$V_{1,0} = A + 0.0585\text{pH} \quad (2)$$

代入 $\text{pH}=9$, $V''_{1,0} = -0.7\text{V}$, 可得 $A \approx -1.2\text{V}$.

本实验结果是 $V_{1,0} \approx -0.65\text{V}$, 代入 (2) 式便得 $\text{pH} \approx 9$. 此值与 Ruetschi 按“碱化”理论模型推算出来的数值 9.34 十分吻合. 因此, 本实验结果进一步支持了 Ruetschi, Pavlov 等人提出和发展了的关于硫酸溶液内铅电极上钝化膜内部的“碱化”理论, 证实了 PbO 在阳极氧化膜内稳定存在的条件.

4 结论

铅电极上钝化膜的光电响应源自 PbO 层, 当电极上钝化膜的厚度不大时, 光电流峰值与膜内 PbO 的数量成正比. 将线性电位扫描过程中记录下的 PbO 的零光电流电位值作为近似的 PbO 平带电位值, 算得钝化膜内 PbO 层的 pH 值为 9 左右, 进一步肯定了“碱化”理论模型.

参 考 文 献

- [1] Pavlov, D., *Advances in Lead-Acid Batteries* (Ed. by Bullock, K. R., Pavlov, D.), The Electrochem. Society Inc., 1984, 110.
- [2] Barradas, R. G., Nadezhdin, D. S., *J. Electroanal. Chem.*, 126 (1981), 273.
- [3] Barradas, R. G., Nadezhdin, D. S., Shan, N., *J. Electroanal. Chem.*, 147 (1983), 193.
- [4] Buchanan, J. S., Freestone, N. P., Peter, L. M., *J. Electroanal. Chem.*, 182 (1985), 383.
- [5] Ruetschi, P., *J. Electrochem. Soc.*, 120 (1973), 331.
- [6] Pavlov, D., Iordanov, N., *J. Electrochem. Soc.*, 117 (1970), 1107.
- [7] 杭瑚, Barradas, R. G., Nadezhdin, D. S., 中国科学技术大学学报, 16 (1986), No. 3.
- [8] Hardee, K. L., Bard, A. J., *J. Electrochem. Soc.*, 124 (1977), 215.
- [9] Morrison, S. R., *Electrochemistry at Semiconductor and Oxidized Metal Electrodes*, Plenum Press, New York, 1980, 154.

Photoelectrochemical Study on Some Properties of Passive Films on the Lead Electrode in H_2SO_4 Solution

Hang Hu

(China University of Science and Technology)

D. S. Nadezhdin R. G. Barradas

(Carleton University, Ottawa, Canada)

Abstract

After the lead electrode in H_2SO_4 solution was anodically polarized, the linear potential sweep in negative direction followed immediately and the linear sweep voltammogram and corresponding curve of the sweep potential-photoelectric current were recorded simultaneously. It was shown experimentally that the peak value of the photoelectric current was directly proportional to the amount of PbO in passive layer when it was not thick. Having calculated the pH value (~ 9) we could further confirm the theoretical 'alkaline' model about the passive films on Pb in H_2SO_4 solution.

Key words, photoelectrochemical method, sulphuric acid solution, lead electrode, passivation film.

原白头翁素的提取, 合成及保存研究

朱胄远 杨云陶 莹 莫东荣 伍越环

(中国科技大学)

吴恭谦

(安徽农学院)

摘 要

从白头翁(*Pulsatilla Chinesis*)植物中提取与人工合成了毛茛科植物含有的原白头翁素和白头翁素。经UV、IR、NMR、MS等光谱分析鉴定, 结构正确。经果蝇、水稻白叶枯病菌等生测试验表明, 原白头翁素具有杀虫活性和显著的抑菌活性。原白头翁素聚合后, 生物活性明显降低。

关键词: 杀虫活性物质, 白头翁(*Pulsatilla Chinesis*), 原白头翁素, 提取与合成。

1 引言

从天然产物中寻找有生物活性的物质作为雏型, 进行模拟合成和改性, 是发展新农药的一种有效途径。据我国土农药记载^[1], 在许多农村中使用毛茛科植物提取液, 对多种农业害虫有较好的杀虫效果, 同时对小麦、水稻等病菌孢子发芽有很好的抑制作用。但是, 关于毛茛科植物杀虫活性成分的研究, 迄今国内外均未见报道。我们从毛茛科植物白头翁中获得了原白头翁素及其二聚体白头翁素, 其结构是经UV、IR、NMR、MS确定的。我们并以乙酰丙酸为原料合成了原白头翁素。经果蝇、小麦赤霉病菌、水稻白叶枯病菌等生测试验表明, 原白头翁素具有杀虫活性和很好的抑菌效果。为人们从天然植物中寻找新农药开辟了一个新的途径。

2 实验方法、结果与讨论

2.1 从白头翁植物中提取原白头翁素^[2]

1986年7月11日收到。

* 中国科学院科学基金资助的课题。

将新鲜白头翁（安徽滁县施集药材站提供）全草切细研碎约300g，放入3000ml圆底烧瓶中，加pH≈7.2的缓冲溶液浸泡12小时，进行水汽蒸馏，馏出液约收集1500ml，加NaCl饱和，用乙醚萃取4次，合并的乙醚萃取液用无水Na₂SO₄干燥、过滤，在旋转蒸发器上浓缩至小体积。以上操作重复若干次，可得浓缩液25~30ml。进行薄板层析分离（硅胶G，260目）。我们试验了苯—氯仿、苯—乙醚、氯仿—乙醚、苯—丙酮、苯—乙酸乙酯、氯仿—乙酸乙酯等各种不同体系展开剂，找到展开剂用CHCl₃:Et₂O=4:1（体积比）分离效

表1 R_f0.78（原白头翁素）组分的结构分析结果

化合物	实验值	文献值	说明
原白头翁素 (Protoanemonin)	UV: λ _{C₂H₅OH} 260nm	263nm	与文献[2]值符合
	IR (KBr)cm ⁻¹ :		
	1778, 969, 1740,	1776, 969, 1745,	
	1122, 873, 1281,	1124, 873, 1280,	与文献[4]值符合
	1064, 1661	1064, 1650	
NMR (CDCl ₃):		与文献[5]值符合	
δ5.15, 4.85	5.15	δ5.15为质子3,3'	
δ6.33	6.30	δ6.33为质子2	
δ7.60	7.50	δ7.60为质子1	

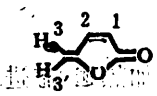


表2 R_f0.78组分的果蝇培养基混药法毒力测定结果
(原白头翁素0.2%，47.5%乙醇水溶液)

序 次	果蝇基数 (只)	12小时			24小时		
		死亡数 (只)	死亡率 (%)	平均死亡率 (%)	死亡数 (只)	死亡率 (%)	平均死亡率 (%)
0.011	2600	15	57.7	18	69.2		
0.012	3400	20	58.8	60.57	29	85.3	75.6
0.013	2600	17	65.4		19	73.1	
空白对照	3600	2	5.5		3	8.3	

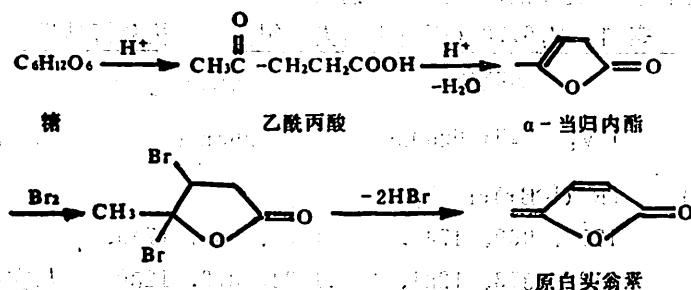
* 空白对照值为三次平均值

果最好，能将样品展出5个点，R_f值分别是：0.19, 0.61, 0.69, 0.78, 0.88(显色)，然后再在大硅胶G板(25×20cm²)上进行制备分离。将展开的五个带分别刮下收集在一起，再分别用乙醇洗脱。制得的组分分别作结构分析与生物测试。经果蝇培养基混药法毒力测定表明，只有R_f0.78的组分才有较好的杀虫活性。该组分经结构分析鉴定为原白头翁素，其它四个组分杀虫活性不明显。R_f0.78组分的结构分析结果与果蝇生测结果分别见表1和表2。原白头翁素在新鲜白头翁中含量约为0.18%，在干根中含量约为0.05%，为浅黄色油状物，熔点m.p.: -5℃，沸点b.p.: 52~53℃/12mmHg。

2.2 原白头翁素的合成

关于原白头翁素合成方法，前人进行了不少研究。比较这些方法的优缺点，考虑产率、原料易得及反应条件较易实现等因素，我们选定了 Grundmann^[6]的合成方法，即由乙酰丙酸缩合得 α -当归内酯，经加 Br₂ 消去得原白头翁素，并对该法作了一些改进。

合成路线如下：



2.2.1 乙酰丙酸的合成

由蔗糖（或葡萄糖）原料合成乙酰丙酸过程中，采用的是在 HCl 水溶液中加热回流进行反应，其反应条件及结果见表 3。

由表 3 可见，由于我们改善了反应条件（提高反应温度和溶液中的酸度，同时稀释反应物浓度），减少了炭化现象，抑制了副反应，使乙酰丙酸的产率从文献值的 20.6%^[3] 提高到 43%（蔗糖原料）或 35%（葡萄糖原料）。

表 3 制备乙酰丙酸的反应条件和产率

原料	原料量 (g)	水 (ml)	浓 HCl (ml)	水:酸	浴温 (°C)	反应时间 (hr)	产量 (g)	产率 (%)
蔗糖	100	200	50	4:1	126—128	30	10.2	15.0
	100	200	50	4:1	136—138	25	17.8	26.3
	100	200	60	3.3:1	136—138	26	27.0	39.8
	100	250	75	3.3:1	130—132	27	29.6	43.7
葡萄糖	100	100	100	1:1	*	24	11.3	19.0
	100	100	100	1:1	125—129	24	10.3	17.5
	100	200	170	1.2:1	122—124	24	20.5	35.0

* 反应瓶内沸腾

制备的乙酰丙酸：b. p. 162°C/20mmHg, NMR(CCl₄): δ 2.17(s, 3H), δ 2.67(m, 4H), δ 9.33(s, 1H), 与标准谱图一致。

2.2.2 α -当归内酯的合成

在烧瓶中加入乙酰丙酸 56.8g，磷酸 ($d=1.7$) 0.568g，装上真空蒸馏装置，缓慢升温，约 2 小时后产物和水开始一起蒸出，馏出液用 Na₂SO₄ 干燥，第二次真空蒸馏得无色纯内酯 (b. p. 72—74°C/35mmHg) 35.6g，产率 74.2%，NMR: δ 1.99(m, 3H), δ 3.09(m, 2H),

δ 5.10(m, 1H), 与标准谱图一致。


在生成当归内酯的缩合反应中, 我们通过对二次蒸馏产物的 NMR 分析, 发现其中含有乙酰丙酸及 β -当归内酯(), 其 NMR 谱为 δ 6.00(m, 1H), δ 7.50(m, 1H), δ 1.49(d, 3H)) 因而采取缓慢升温、控制反应温度避免局部过热, 减少了乙酰丙酸的带出及防止了 α -当归内酯变为更稳定的 β -当归内酯。在实验中: 当从较快加热 (10 分钟开始蒸出) 改变成很慢加热 (2 小时开始蒸出) 时, α -当归内酯的产率可以由 62% 增加到 74%。但是由于我们受冷凝条件的限制, 真空抽走损失较大, 得到的产率比文献 [3] 值 95% 增为低。冷却效果对制备 α -当归内酯产率的影响见表 4。

表 4 制备 α -当归内酯冷凝的影响

乙酰丙酸量 (g)	磷酸量 (g)	冷却方式	产量 (g)	产率 (%)	说明
36.5	0.36	水	10.4	32.8	
20.0	0.20	冰水	8.3	49.1	
50.0	0.57	冰盐	26.0	62.0	较快加热
56.8	0.57		35.6	74.2	很慢加热

2.2.3 原白头翁素的合成

在三颈瓶中加入 α -当归内酯 12.9g, CS_2 15ml, 放入冰盐浴中, 在 $-20^\circ C$ 以下滴加溴 17.5g, 减压除去 CS_2 , 用 100ml 无水乙醚稀释残液, 再在 $-20^\circ C$ 滴加 28g 喹啉, 加入少许对苯二酚放置过夜, 抽滤, 蒸去乙醚, 得红棕色溶液。加少许对苯二酚后进行真空蒸馏, 收集 $62-64^\circ C/17mmHg$ 馏份, 用 N_2 保护进行第二次真空蒸馏, 得浅黄色油状物原白头翁素 3.2g。谱分析得


UV: $\lambda_{max}^{H_2O}$ 60mm,

IR(KBr) cm^{-1} : 1775, 1745, 1650, 969, 1124, 1064, 1280, 873,

MS(m/e): 42, 54, 68, 96,

NMR($CDCl_3$): δ 5.13(m, $H_{2,3}$), δ 4.85(d, H_1);

δ 6.23(d, $J=6.0, H_2$), δ 7.60($J=6.0, H_1$).

在文献 [5] 中原白头翁素核磁谱的端基两个氢原子皆为 δ 5.15, 我们每次测定在 δ 4.55 还有一峰, 而且只有 δ 4.85、 δ 5.15 两峰积分高度相加, 才符合与其它两峰的 2:1:1 的面积比关系。这是因为从分子式  两端氢的环境不同, 从 Tobey-simon 公式^[7]推测: $\delta_{H_2} > \delta_{H_3}$, 与 5.15 $>$ 4.85 相符。

我们发现按文献 [6] 的条件加溴量较少 (分子比为 1:0.73), 造成内酯过量, 在产物谱图中有 α -内酯存在。我们增加了 Br_2 用量, 分子比为 1:0.87 时较好。具体反应条件和结果见表 5。

原白头翁素产物于冰箱中放置几天后会有白色沉淀出现, 过滤, 从氯仿中重结晶, 加活

表 5 制备原白头翁素时加溴量对产率的影响

内酯量 (g)	加溴量 (g)	内酯·溴 分子比	产量 (g)	产率 (%)	溶剂
12.5	14.9	1:0.73	1.7	19.0	CS ₂
18	18.5	1:0.65	2.46	21.0	CS ₂
12.9	18.3	1:0.87	3.2	29.0	CS ₂
13.3	19.5	1:0.90	1.1	9.4	乙醚

性碳处理, 可得白色晶体, 经分析证明是白头翁素. m.p. 149°C - 150°C, UV, $\lambda_{max}^{EtOH} = 207\text{nm}$, IR (KBr) cm^{-1} : 3100, 3020, 1778, 1630, 1250;

NMR (CDCl₃), δ 2.45 (m, -CH₂CH₂-), δ 6.14 (d, J = 6.0 $\begin{matrix} \text{H} \\ \diagup \\ \text{C} \end{matrix}$), δ 7.72 (d, $\begin{matrix} \text{C}=\text{H} \\ | \\ \text{C}=\text{O} \end{matrix}$) 与有关文献 [8] 报道相符。

2.3 原白头翁素的稳定保存和杀虫活性

原白头翁素很不稳定. 根据报道, 原白头翁素在 -50°C 下光照亦可聚合为白头翁素. 理论上解释是因为原白头翁素的结构, 在光照下 [2+2] 的环加成有利于二聚, 加热有利于高聚. 我们观察原白头翁素在常温下放置过夜即有白色沉淀 (白头翁素) 产生, 暴露在空气中加热马上会产生棕色高聚物. 用黑纸包裹于 -20°C 下放置, 凝成固体 (m.p. -5°C), 在 2-3 天内基本不变化。

我们试验了在不同溶剂体系中, 保存期对原白头翁素 0.2% 溶液的影响, 用紫外光谱测定的结果见表 6. 表明原白头翁素在乙醇、乙醚、氯仿中保存较稳定, 在丙酮、水溶液中保存效果最差。

表 6 0.2% 原白头翁素在不同溶剂中保存的紫外光谱结果* (nm)

保存期	水中	乙醇中	乙醚中	丙酮中	石油醚中	氯仿中
一天后	210	-	-	-	-	-
一周后	210	260	260	210	263	263
一月后	210	260	260	210	210	266

* $\lambda \approx 260\text{nm}$ 表明以原白头翁素形式存在, $\lambda \approx 210\text{nm}$ 表明以白头翁素形式存在。

我们还试验了 0.25% 原白头翁素水溶液保存期对杀灭果蝇效果的影响, 结果见表 7. 从表中可以看出, 原白头翁素水溶液随保存期延长而杀虫活性大大降低, 这是因为原白头翁素部分聚合为白头翁素, 后者无杀虫活性. 测定其杀灭果蝇的死亡率仅为 0 (12 小时)、7.7% (24 小时) 和 8.5% (48 小时)。

原白头翁素不仅对果蝇具有杀虫活性, 同时在抑菌方面效果更加显著. 例如人工合成的原白头翁素的 0.25% 水和酒精溶液, 对小麦弯孢霉属病菌孢子萌发抑制率以及对水稻白叶枯病菌抑菌率都达到 98% 以上, 见表 8 和 9。

表 7 0.25%原白头翁素水溶液不同保存期对果蝇
(*D. melanogaster*) 杀灭效果 (培养基混药法)

保存期	次数	12小时			24小时		48小时	
		基数 (只)	死亡数 (只)	平均死亡数 (%)	死亡数 (只)	平均死亡数 (%)	死亡数 (只)	平均死亡率 (%)
当天	1	34	32		33		34	
	2	28	21	84.8	25	91.3	28	100
	3	30	25		26		30	
9天	1	26	2		17		18	
	2	27	8	17.5	8	47.5	11	57.5
	3	27	4		13		17	

表 8 小麦弯孢霉属孢子萌发抑菌结果

样品	检查孢子数	孢子萌发数	抑制率 (%)	校正抑制率 (%)
0.25%原 白头翁素	47.5% 乙醇水溶液 623	4	99.4	99.4
	水溶液 704	11	98.4	98.4
	水溶液 621	6	99.0	99.0
	空白对照 617	601	2.6	-

表 9 水稻白叶枯病抑菌圈法测定结果 (28°C)

样品	处理前菌碟 直径 (mm)	处理后72小时 菌碟直径 (mm)	抑制率 (%)	说明
0.25%原 白头翁素	47.5% 乙醇水溶液 0	0	100	皿内无任 何杂菌生长
	水溶液 0	0	100	
	水溶液 0	0	100	
	空白对照 0	5.59		有杂菌生长

3 结语

(1) 我们从白头翁植物中提取及按 Grundmann 基本合成路线并作了一些方法与条件改进进行人工合成, 获得了毛茛科植物含有的原白头翁素和白头翁素。经 UV、IR、NMR、MS 分析鉴定, 结构正确。经果蝇测试表明, 原白头翁素具有杀虫活性, 而白头翁素的杀虫活性不明显。同样, 水稻白叶枯病抑菌试验也表明原白头翁素具有很好的抑菌效果。

(2) 提取、合成的原白头翁素及保存的研究表明, 原白头翁素极不稳定, 仅能在低温

条件下存在或作短期保存。为此，必须重视其衍生物的研究，从中找出较稳定的衍生物，研究和控制其相互转化的机理、手段。这对新农药的开发具有重要意义。

我校十二系紫外、红外、核磁室的施丽君、陈昆松、柯玉屏同志对本工作结构分析方面给予大力协助，安徽大学化学系孙熊鸣老师提供帮助，胡茂水、曹宗培同学参加部分工作，在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 中国科学院昆虫所化防室，昆虫知识，1959 (10)，331—335.
- [2] U. S., Pat. 3 203 863, 1965.
- [3] Peter, P. T. S., *J. Am. Chem. Soc.* 52 (1930), 4881.
- [4] Ferretti, A., *J. Agr. Food Chem.* 18 (1970), No. 1, 13—18
- [5] Mirsa, S. B., *Ecot. Bot.*, 34 (1980), 360.
- [6] Grundmann, C., *J. Am. Chem. Soc.*, 77 (1955), 2333.
- [7] 陈德恒，有机结构分析，科学出版社，北京，1985，57.
- [8] Camps, P., *Tetrahedron*, 31 (1975), 2581.

Studies on the Extraction, Synthesis and Preservation for Protoanemonin

Zhu Zhouyuan Yang Yun Tao Ying
Mo Dongrong Wu Yuehuan

(University of Science and Technology of China)

Wu Gongqian

(Academy of Agriculture of Anhui)

Abstract

Protoanemonin and anemonin which exist in *Ranunculaceae* were extracted from *Pulsatilla Chinesis* and synthesized in our laboratory. It is proved respectively that their structures are correct by their spectra (UV, IR, NMR, MS). Through tests on *D. melanogaster* and *Xanthomonas oryzae* Douson, protoanemonin shows pesticidal and relatively high fungus-inhibiting activities. When protoanemonin polymerized, these activities are distinctly decreased.

Key words: pesticidal active substances, *Pulsatilla Chinesis*, protoanemonin, extraction and synthesis.

锡和锌复合氧化物的合成及其缺陷结构

陈祖耀 贾 瑛 张祖德 钱逸泰

(应用化学系)

摘 要

本文采用化学共沉淀和固相反应相结合的方法,制备掺杂和不掺杂的具有反尖晶石结构的锡和锌复合氧化物,还比较详细地研究了它的电导与氧分压、温度和掺杂物之间的关系以及相应的缺陷结构。并根据 Seebeck 效应的测定推测其在 700—900°C 的范围内具有小极化子的热激活跃迁机制。

关键词: 复合氧化物, 缺陷, 反尖晶石, 非化学计量, 氧化物电导, 氧空位, 二氧化锡, 氧化锌, 塞贝克效应, Zn_2SnO_4 。

1 引言

纯氧化锌或氧化锡,作为一种很好的气敏半导体的基底材料,广泛地引起人们的注意。一般认为它们都是 n 型氧化物半导体材料,只是氧化锌是金属过剩而二氧化锡是氧缺位^[1-3]。虽然它们的非化学计量偏离都不大,但是足以大大影响材料的电学性质,特别是气体敏感性质,如灵敏度和长期工作稳定性。然而可通过各种不同的化学制备改变非化学计量偏离值来控制气敏效应。不少作者从不同的氧化物形态,如单晶、烧结体、薄膜等方面,报道了这两种单个氧化物的电导和高温下的化学缺陷^[1, 3-5]。由于它们的电性质强烈地依赖于制备方法以及在各种气氛下的热处理,因而各个作者的研究结果之间有一定的差异,但是总的认为,二氧化锡在温度和氧分压分别为 1370—1620K 和 10^{-2} —1 atm 时,其主要的本征缺陷是二次离化的氧空位^[3];当氧分压大于 0.3 torr 时,电导率与氧分压的关系服从关系式 $\sigma = k p^{-1/4}$ ^[2]。氧化锌的电导率也有类似的变化,只是其氧的扩散系数与氧分压的关系比较复杂。

单个纯氧化物的结果引起人们对其不同掺杂氧化物以及它们相互之间形成的复合氧化电导和高温缺陷^[6-9],特别是制备方法和电性质之间的关系,与组分氧化物气敏性质的差异以及它们的缺陷结构或缺陷机制的兴趣^[6-9]。这些方面的详细报道并不多。

目前已经知道 Zn_2SnO_4 具有反尖晶石结构。有人采用直流电极法,在 900—1300°C 和

10^{-1} —1 atm 氧分压的范围内, 测量了它的高温电导与氧分压的关系, 显示它与各个组分氧化物类似, 但尚未见有详细的报道和更进一步的工作。从作者所测得的气敏效应来说, Zn_2SnO_4 具有一定的特点^[10], 值得深入研究。

本文采用水溶液化学合成法, 制备掺杂的和不掺杂的 ZnO 和 SnO_2 , 定比成混合氧化物粉料, 并研究了其固相反应合成 Zn_2SnO_4 的条件, 对其在 $700-900^{\circ}C$ 温度范围内的直流电性能进行了测试, 还比较详细地讨论了它的电导与氧分压、温度和掺杂的关系以及相应的缺陷机制。

2 实验部分

2.1 样品制备

四氯化锡和氯化镱分析纯试剂, 经重结晶纯化两次, 把它们在水溶液中按比例混合, 在加热下用氨水水解, 经老化过滤洗涤, 于 $150^{\circ}C$ 下烘干, 再在 $500^{\circ}C$ 下预烧 5 小时以上。预烧后的粉料经研磨后用压片机, 以表压 $200-250kg/cm^2$ 的压力, 把粉料压成 $3 \times 5 \times 20mm$ 的条状。成型后的条状混和物置于刚玉坩埚中, 样品的上下左右都复盖有相同组分的混合氧化物粉料, 在空气气氛中, 用铂丝炉或其它高温炉进行固相反应, 反应温度在 $800-1500^{\circ}C$ 范围内变化, 反应时间从 1 小时到 10 小时不等。有的试料在固相反应前还在 $800-900^{\circ}C$ 预烧数小时, 烧后的样品经重新研磨, 压成条状, 再烧成。烧成后自然冷却到室温。必要时, 在 $500^{\circ}C$ 下退火处理。

掺有 $0.2-0.5\%$ 杂质 Fe、Ni 的样品, 也用同样方法制备, 只是在水解前将杂质氯化物按比例加入到锡和镱的氯化物溶液中。

2.2 样品的物相分析和化学分析

固相反应后产物的物相分析, 是在日本理学 D/MAX-YA 转靶 X 射线衍射仪上进行的。Cu($K\alpha$) 辐射, 加速电压为 $40kV$, 工作电流 $50mA$ 。固体样品的化学分析, 系用 6 E3 苏制火花光源光谱仪的发射光谱, 作半定量分析。基质锡和镱复合氧化物的杂质含量除 Ni 小于 0.0003% 外, 其它如 Cr, Ti, Li, Fe 及 Al 均小于 0.001% 。X 光荧光光谱分析也有类似结果。添加杂质后的锡和镱的复合氧化物, 杂质含量在 $0.2\%-0.5\%$ 之间。用此法制得的样品密度为 $5.73g/cm^3$ 。

2.3 电导和 Seebeck 效应的测量

电导测量装置如图 1 所示。条状样品上紧紧地绕有铂丝电极并采用银浆 (最好用铂浆把样品固定在测量支架上。一般采用两端制电极在空气中测量电导与与温度的关系。当测量电导率与氧分压的关系时, 其中的氧分压测量系采用日本生产的二氧化镱固体氧电池, 该电池本底电势较小, 如有必要也可在计算中加以校正。测量范围一般不超过 $950^{\circ}C$, 温度控制系用铂—铂铑热电偶, 与温度对应的电势值可从 WM 2-1 型数字毫伏表读出。

Seebeck 效应即温差电动势的测量装置基本上与图 1 相同, 只是在测量时先用铂浆把样品两端分别与两支电热偶的结点相联。热电偶既被用来测量样品两端的温度, 又可作为温差热电势测量的两个电极。此时还应把图 1 中的氧电池部分改成一个一端封闭的石英管, 封闭处紧靠样品的一端。管子的中间另有一开口的细导管插入, 通有来自空气钢瓶的空气流。空气流在靠近封闭端溢出膨胀可使该处温度下降。当采用不同的空气流速时, 样品两端

的温度差可在 1—5°C 的范围内变化。

一般的电导测量采用 C31— μ A 型电流表。必要时，电导和温差势电势的测量采用日本 Takada Riken 公司的 TR 8651 高精度多用电表。

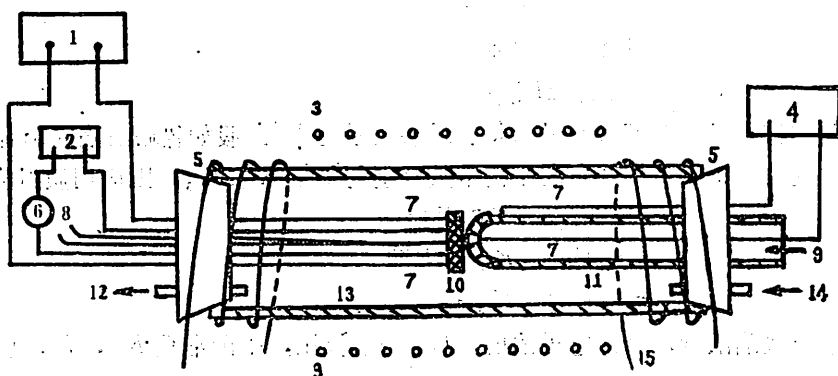


图 1 电导率测定装置示意图

- 1、直流稳压电源； 2、TR8651 多用电表； 3、电炉； 4、精密电位仪；
 5、磨口石英； 6、微安表； 7、铂引线； 8、铂铑热电偶；
 9、参比气体进出口； 10、试样； 11、ZrO₂ 氧电池；
 12、出气口； 13、石英管； 14、进气口； 15、冷却水套。

3 结果与讨论

3.1 锡和锌复合氧化物的合成条件

实验指出，锡锌复合氧化物是反尖晶石结构，它的合成与固相反应温度和烧结时间有关。从 800°C 开始即出现反尖晶石相 Zn₂SnO₄，随温度的提高，烧结时间的增长，有利于尖晶石相的出现；1000°C 烧结 10 小时的样品，杂质相已经很少；在 1100°C 和 1200°C，即使烧结 3 小时，只要分组比例合适，在 X 射线衍射图谱上不在出现杂质相。由此看来，由均相水解制备粉料的固相反应条件比由试剂 ZnO 和 SnO₂ 机械混合所得到的固相反应条件温和得多^[11]。

3.2 导电类型

理论上用实际测定的浓差电池电动势 $E = \frac{RT}{4F} \int_{p'_{O_2}}^{p''_{O_2}} d \ln p_{O_2}$ 来测定化合物的离子迁移数

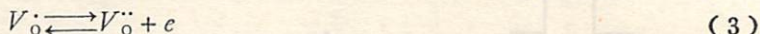
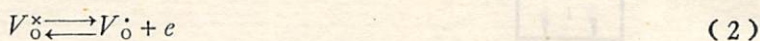
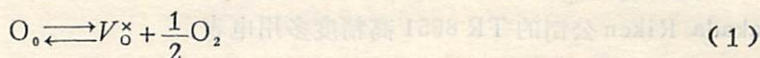
t_i (式中 R 和 F 分别为气体常数和法拉第常数， p'_{O_2} 和 p''_{O_2} 分别为试样两侧的氧分压)，从而确定它是电子电导，还是离子电导，或是混合电导。这里，我们测定了基质 Zn₂SnO₄ 的总电导和直流电导，并由此推测 Zn₂SnO₄ 中基本上是电子电导。

3.3 锡和锌复合氧化物的缺陷结构

3.3.1 氧分压与基质复合氧化物 Zn₂SnO₄ 电导的关系

在 700~900°C 范围内测得纯 Zn₂SnO₄ 的电导率与氧分压的关系如图 2 所示 (ρ 为电阻率，与电导率是倒数关系，下同)。由图可以清楚地看到，对于无掺杂的纯样品，在 10⁻⁴—1 个 atm 范围内，电导率与 $P_{O_2}^{-1/4}$ 成正比。这与熔融法制备的 Zn₂SnO₄ 在 900°—1300°C 范围内所测定的结果完全一致^[8]，也类同于其组分氧化物 SnO₂ 和 ZnO 的相应关系^[1, 2]。由

此可以推测在 900°C 以下也应当具有 n 型半导体的性质, 即 Zn_2SnO_{4-x} 的性质。当该复合氧化物与周围氧分压处于平衡状态时, 可以认为有以下缺陷反应:



这里, 点缺陷的符号是按 Kröger—Vink 表示法表示的^[12]。假如忽略缺陷间缔合的相互作用, 并设缺陷反应 (1) — (3) 的平衡常数分别为 K_1, K_2, K_3 , 则应用质量作用定律得

$$[V_o^\times] = K_1 \cdot P_{O_2}^{1/2} \quad (4)$$

$$n \cdot [V_o^\cdot] = K_2 \cdot [V_o^\times] \quad (5)$$

$$n \cdot [V_o^{\cdot\cdot}] = K_3 \cdot [V_o^\cdot] \quad (6)$$

式中 $[]$ 表示点缺陷浓度, n 是电子浓度, P_{O_2} 为氧分压, 平衡常数 K_2, K_3 可由下式给出^[13]

$$K_2(T) = (2\pi m^* kT/h^2)^{3/2} \exp[(-eV_1/kT)]$$

$$K_3(T) = (2\pi m^* kT/h^2)^{3/2} \exp[(-eV_2/kT)]$$

其中 $m^*, k, h, e, T(K), V_1, V_2$ 分别为电子有效质量、波尔兹曼常数、普朗克常数、电子电荷、绝对温度、第一、第二电离势。当电子浓度由电中性条件近似地表示为下式时,

$$n = [V_o^\cdot] + 2[V_o^{\cdot\cdot}] \quad (7)$$

则可以分为两种情况来处理:

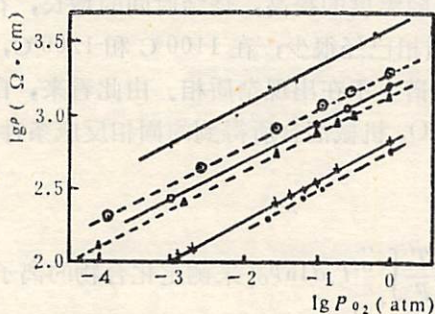


图 2 基质 Zn_2SnO_4 电导率与氧分压的关系

• 740°C (1200°C); ○ 740°C (1100°C)

○ 790°C (1200°C); ▲ 790°C (1100°C)

× 840°C (1200°C); ■ 840°C (1100°C)

括号内外的温度分别为样品烧成温

度和样品测定电导率时的温度

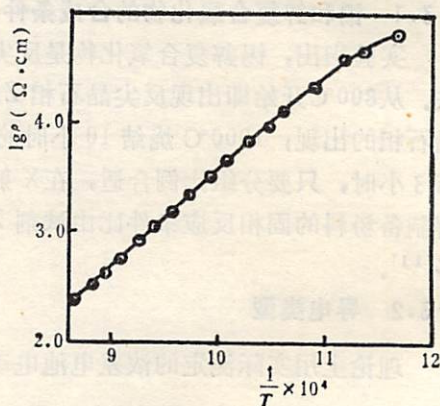


图 3 基质 Zn_2SnO_4 在空气中的电导率与温度的关系

(i) 如果正一价阴离子空位的浓度远大于正二价阴离子空位的浓度, 即 $[V_o^\cdot] \gg [V_o^{\cdot\cdot}]$ 时, 电中性条件可简化为

$$n = [V_o^\cdot] \quad (8)$$

由式 (4)、(5)、(8) 可得 $[V_{\text{O}}^{\bullet}] = n = \sqrt{K_1 K_2} \cdot P_{\text{O}_2}^{-1/4}$

(ii) 若离子化的氧空位以 V_{O}^{\bullet} 为主, 则电中性条件可简化为

$$n = 2[V_{\text{O}}^{\bullet}] \quad (9)$$

由式 (4)、(5)、(6)、(9) 可得

$$[V_{\text{O}}^{\bullet}] = \frac{n}{2} = \frac{1}{2} (2K_1 K_2 K_3)^{1/3} \cdot P_{\text{O}_2}^{-1/6}$$

当传导电子的迁移率与其浓度无关时, 电导率 σ 将正比于传导电子的浓度^[13]。

由此表明, 不同的缺陷结构将导致不同浓度的载流子, 而且材料电导率与氧分压之间也有着不同的依存关系, 这意味着缺陷结构可以通过材料的电导率与氧分压的依存关系进行推断。显然, 根据图 2 的实验结果, 可以认为在基质 Zn_2SnO_4 中主缺陷是一次电离的氧空位。事实上从纯 Zn_2SnO_4 的电导率与温度关系的曲线 (图 3) 也已经可以指出, 该化合物具有负的电导温度系数, 其电导活化能为 163.5 kJ/mol, 这与最近报道的文献值 169 kJ/mol 基本一致^[8]。

需要指出的是, 当我们从另一角度考虑时, 或许还可以认为样品中存在着以金属填隙为主的化学缺陷, 从中也能得出电导与氧分压的 1/4 次方成反比, 不过, 间隙将导致晶格发生极大的畸变^[14]。从我们的实验中, 无论采取何种热处理, 即使在高达 1500°C 烧成后的试样中, 晶格常数并未发生显著变化, 因此可以认为其主缺陷并不是以间隙离子存在的。

3.3.2 杂质对电导的影响

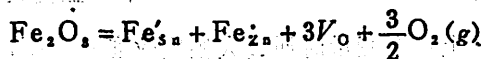
杂质的掺入在很大程度上影响 Zn_2SnO_4 的电导率以及与温度和氧分压的依赖关系。本工作所选择的杂质分别有 Fe^{3+} 、 Ni^{2+} 。

(1) Fe^{3+} 杂质

根据掺 Fe^{3+} 的 Zn_2SnO_4 的电导率与温度的关系, 求出 Fe^{3+} 掺杂体系的电导活化能 Q_c 为 167.53 kJ/mol, 即比纯 Zn_2SnO_4 的电导活化能稍有增加, 预示掺杂后, 电导率将适当下降。事实上, 掺 Fe^{3+} 的 Zn_2SnO_4 体系的电导率与氧分压的依赖关系如图 4 所示。图中 $\lg \rho - \lg P_{\text{O}_2}$ 直线的斜率近似于 1/5, 即电导率与氧分压成 -1/5 的指数关系。

Fe^{3+} 的价电子层结构为 $3d^5$, 由于配位体 O^{2-} 的配位场强度较低, 使 Fe^{3+} 呈高自旋态, 而高自旋的 d^5 离子不论在八面体场中, 还是在四面体场中均不会获得配位场稳定化能。 Fe^{3+} 没有对四面体位或八面体位呈现特殊的占有倾向。

掺入 Fe^{3+} 杂质后, 由于材料中存在的主缺陷是非金属空位, 则缺陷化学反应为



$$\sigma = c(T) \cdot P^{-1/5} \quad (10)$$

但是对于 $n=5$ 的 (10) 式与认为氧空位是唯一传导电子来源两者是不一致的, 氧空位模型只能导出 n 为 4 或为 6, 因为电中性条件为

$$[V_{\text{O}}^{\bullet}] + 2[V_{\text{O}}^{\bullet}] + [\text{Fe}_{\text{Zn}}] = e + [\text{Fe}'_{\text{Zn}}]$$

由式 (1)、(2)、(3) 可导出

$$[e]^3 = (K_2/K_3) P^{-1/2} \cdot [e] - 2K_3 \cdot P^{-1/2} = 0 \quad (11)$$

$$[V_{\text{O}}^{\bullet}] = (K_2/K_3) \cdot P^{-1/2} \cdot [e]^{-1} \quad (12)$$

$$[V_o] = K_2 \cdot P^{-1/2} [e]^{-2} \quad (13)$$

$$[V_o] = (K_2/K_1 \cdot K_3) \cdot P^{-1/2} \quad (14)$$

令 $R = [e]/K_3$ ，则可解出

$$R = x^{1/3} \{ [1 + (1-x/2)]^{1/2} \} \quad (x \leq 27)$$

$$R = (2/\sqrt{3}) x^{1/2} \cos \left[\frac{1}{3} \tan^{-1} (x/2 - 1)^{1/2} \right] \quad (x \geq 27)$$

其中 $x = A(T) \cdot P^{-1/2}$ ， $A(T) = K_2/K_3$

$$K_2 = K_{2,0} \exp(-e \cdot V_{II}/KT)$$

其中 $e \cdot V_{II}$ 是形成双电离氧空位所需的能量

$$K_3 = (2\pi m^* kT/h^2)^{3/2} \exp[(-cV_2)/KT]$$

由此看出，对于小的 x 值，氧空位倾向于双电离，此时 $\sigma \propto P_o^{-1/6}$ ，对于较大的 x 值，倾向于形成低的电离状态，此时 $\sigma \propto P_o^{-1/4}$

但是，应该存在一个中间区域，在此区域中，两种状况都应有所兼顾，即无论是一次电离的或双电离的氧空位都不能被忽略。实验结果，式(10)对于 $n=4$ 及 $n=6$ 都不能很好地满足，致使电导率等温线的斜率近于 $n=5$ ，当然这是在一个有限的区域内发生的。

实际上， x 的值主要是由参数 $A(T)$ 决定的，而决定 A 值的是形成未电离空位所需的能量及第一，第二电离能。后者主要由有效介电常数及被束缚在空位上的电子的有效质量决定的^[13]。因此，也可以认为掺 Fe^{3+} 的 Zn_2SnO_4 体系中存在的缺陷形式是氧空位。只是由于 Fe^{3+} 的掺入使得 x 落入中间值，既有一次电离的也有两次电离的氧空位存在。

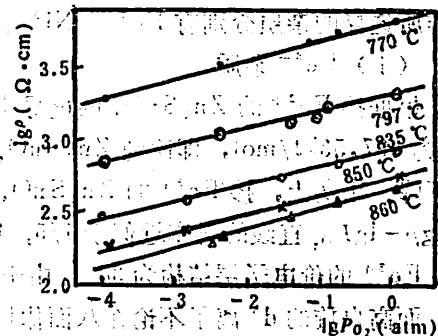
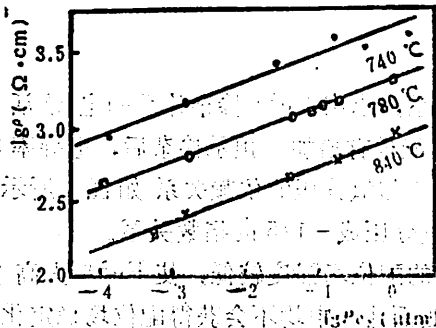


图 4 $Zn_2SnO_4(Fe)$ 电导率与温度的关系
图中的温度系测量电导时的温度

图 5 $Zn_2SnO_4(Ni)$ 电导率与氧分压的关系
图中的温度表示测量电导时的温度

这种设想是否合理，理论上可在测量时通过大幅度改变氧分压，考察 n 值有无变化来初步确定，但是由于达成反应平衡所需要的时间很长，氧化锌又有挥发等问题，所以实际测定有一定的困难。

(2) 掺 Ni^{2+} 杂质

图 5 是掺 Ni^{2+} 的 Zn_2SnO_4 样品的电导率与温度的关系。由图可以求出 Ni^{2+} 掺杂试样的导电活化能 Q 为 $285 kJ/mol$ ，该值也比纯 Zn_2SnO_4 的电导活化能有所增加，这表明掺杂后的电导率下减。掺 Ni^{2+} 的 Zn_2SnO_4 体系的电导率与氧分压的关系如图 6 所示，图中电导等温线的斜率近似于 $1/8$ ，即电导率与氧分压成 $-1/8$ 次方的指数关系，

Ni^{2+} 为 $3d^8$ 构型, 其附加的八面体场稳定化能超过了马德隆常数的作用, 因为八面体位的稳定化能通常比四面体大, $\Delta_o > \Delta_t$, 所以 Ni^{2+} 有强烈地进入八面体位的倾向^[6]。另外若从离子半径等几何因素和电荷匹配考虑, 认为 Ni^{2+} 取代进入八面体位也是合理的。 Ni^{2+} 进入八面体位后, 取代原有的 Sn^{4+} 生成 Ni''_{Sn} , 进而考虑到杂质的电离。



$$K_{10} = [e] \cdot [Ni'_{Sn}] / [Ni''_{Sn}] \quad (16)$$

当认为 $[Ni'_{Sn}] = e$, 则有

$$K_{10} = [e]^2 / [Ni''_{Sn}]$$

由于电中性条件:

$$[V_o^{\bullet}] + 2[V_o^{\bullet\bullet}] = e + [Ni''_{Sn}] + 2[Ni'_{Sn}] \quad (17)$$

假设双电离氧空位是主要阴离子缺陷, 即

$[V_o^{\bullet\bullet}] \gg [V_o^{\bullet}]$, 且认为 $[Ni'_{Sn}] \gg [Ni''_{Sn}]$, 所以近似有

$$[V_o^{\bullet\bullet}] = [Ni'_{Sn}] = [e]^2 / K \quad (18)$$

将式 (18) 代入式 (4) - (6) 中, 即可得

$$n^4 = K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_{10} \cdot P_{O_2}^{-1/2}$$

$$n = (K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_{10})^{1/4} \cdot P_{O_2}^{-1/8}$$

这表明掺 Ni^{2+} 杂质后, 试样中可能存在的主要缺陷形式为 $V_o^{\bullet\bullet}$ 和 Ni'_{Sn} 。

3.3.3 关于锡和锌复合氧化物导电机制的讨论

Seebeck 效应即温度电动势系数的定义为

$$\alpha = \frac{dV}{dt} = -(V_h - V_c) / (T_h - T_c)$$

其中 $V_h - V_c$ 和 $T_h - T_c$ 分别表示试样高温端和低温端之间的电位差和温度差, 载流子的带电符号同 α 一致, 在本实验中, 我们测得的 α 值为负, 说明 Zn_2SnO_4 确是一种 n 型半导体。

通常, 当 n 型半导体载流子浓度沿温度梯度方向近于波尔兹曼分布时, α 可表示为

$$\alpha = -(k/e) [\ln n_0 / n + A] \quad (19)$$

式中 n_0 为传导状态下的有效态密度, n -电子浓度, A -动力学能量输出项, k -波尔兹曼常数, e 为电子电荷。

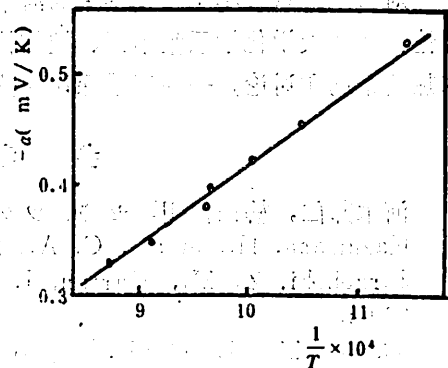
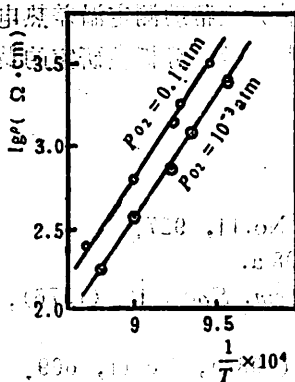


图 6 Zn_2SnO_4 (Ni) 电导率与温度的关系

图 7 基质 Zn_2SnO_4 温差电动势与温度的关系

考虑到 n 型半导体的电导率为

$$\sigma = n \cdot e \cdot \mu \quad (20)$$

(μ 为载流子迁移率)

由式 (19) 和 (20), 可得

$$\frac{d \lg \sigma}{d(kT)^{-1}} - \frac{d(-ea/2.303K)}{d(kT)^{-1}} = Q_0 - Q_1 = \frac{d \lg \mu}{d(kT)^{-1}} + \frac{d \lg n_0}{d(kT)^{-1}} + \frac{d(A/2.303)}{d(kT)^{-1}}$$

当固定氧分压时, 从上式的 σ 与 α 同温度的关系能求得电导活化能及温差电动势活化能, 由此可以推断材料的导电机理。如果 $Q_0 - Q_1 = 0$, 认为主要是能带传导。如果 $Q_0 - Q_1 \neq 0$, 即为小极化子热激活跃迁传导。差值愈大, 愈说明是后者。

图 7 显示基质 Zn_2SnO_4 的温差电动势系数与温度的关系, 由此可见, 随着温度的升高, 基质 Zn_2SnO_4 的温度差电动势系数下降。

基质 Zn_2SnO_4 的电导活化能为 $Q_0 = 163.5 \text{ kJ/mol}$, 而温差电动势活化能 Q_1 为 73.5 kJ/mol 。 $Q_0 - Q_1 \neq 0$, 可以初步肯定基质 Zn_2SnO_4 体系在 $700^\circ\text{C} - 900^\circ\text{C}$ 之间主要是小极化子热激活跃迁传导。

Goodenough 认为^[14,15], 跃迁传导机制的重要特征是具有大的 α 值 ($\alpha > 100 \mu\text{V/K}$)。我们在本工作中获得了不寻常大的 α 值 (0.3 mV/K 以上)。虽然本工作采用的是多晶烧结体样品, 其晶粒间界的作用不可忽略, 但总的比较说来, α 值显然较大, 支持了该体系为小极化子跃迁传导的机制。

4 结论

1) 本文所制备的锡和锌复合氧化物 Zn_2SnO_4 是 n 型半导体材料, 具有反尖晶石结构。我们所采用的共沉淀法先制备混合氧化物粉料, 再进行固相反应, 能够降低固相反应温度。

2) 基质 Zn_2SnO_4 在 $700^\circ\text{C} - 900^\circ\text{C}$ 的主缺陷为氧空位, 其电导率与氧分压的 $-1/4$ 次方成正比, Fe^{3+} 和 Ni^{2+} 的掺入将降低材料的电导率。

3) 由温差电动势的测定, 可以初步确定基质 Zn_2SnO_4 在 $700^\circ\text{C} - 900^\circ\text{C}$ 间的导电机理主要是小极化子的热激活跃迁传导。

作者对日本东京大学工业化化学系的河本邦仁博士、富山胜先生帮助测定温差热电动势和参与讨论, 清华大学化学系张中泰、校结构成分分析中心的黄允兰, 分析教研室的黄碧霞等同志的热情帮助和讨论, 一并表示深切的感谢。

参 考 文 献

- [1] 河本邦仁, 柳田博明, セラミックス, 18 (1983), No.11, 927.
- [2] Kazumasa, H., et al., C. A., 81 (1974), 142608 a.
- [3] Jarzelski, Z. M., Marton, J. P., J. Electrochem. Soc., 123 (1976), No.9, 299 c.
- [4] Yasumichi, M., et al., Yogyo Kyokai Shi, 92 (1984), No.11, 669.
- [5] Islam, M. N., Hakim, M. O., J. Phys., D 18 (1985), No. 1, 76.
- [6] Chang, L. Y., Kaldon, R. C., J. Amer. Ceram. Soc., 59 (1976),

No.5—6, 275.

- [7] Tyson, R. M., Chang, L. Y., *Communication of Amer. Ceram. Soc.*, (1981), No. 1—1, c 4.
- [8] 张中泰, 全国敏感材料、元件及其应用学术交流会论文集, 重庆, 1985, 385.
- [9] 金国群等, 同上, 384.
- [10] 陈祖耀等, 同上, 387.
- [11] Jicpds, W. F. M., et al., *Powder Diffraction File*, 1980, 24—1470.
- [12] Kröger, F. A., *The Chemistry of Imperfect Crystals*, 2 (1974), 944.
- [13] Kevane, C. J., *Phy. Rev.*, **133** (1964), A 1431.
- [14] Kingery, W. D., et. al., *Introduction to Ceramics*, John wiley & Sons, New York, 1976, 157.
- [15] Goodenough, J. B., *Progress in Solid State Chemistry*, 5 (1971), 145.
- [16] Mizusaki, J., et al., *J. Amer. Ceram. Soc.*, 65 (1982), 363.

The Preparation and Its Defect Structure of Tin and Zinc Complex Oxide

Chen Zuyao Jia Ying Zhang Zude Qian Yitai
(Department of Applied Chemistry)

Abstract

Dopant and undopant Tin and Zinc complex oxide that has inverse spinel type structure are prepared by means of the combined method of chemical coprecipitation and solid state reaction in the paper. Dependence of temperature, oxygen partial pressure and dopant on electrical conductivity and relevant defect structure are studied in detail. It is concluded that the conduction mechanism of Zn_3SnO_8 is small polaron hopping conduction mechanism at the range 700°C — 900°C according to the determination of Seebeck effect.

Key words: complex oxide, inverse spinel, defect, non-stoichiometry, oxide conduction, oxygen vacancy, Seebeck effect, Tin oxide, Zinc oxide, Zn_3SnO_8 .

相互作用体系的极化率

刘凡镇 辛厚文

(近代化学系)

摘 要

本文从分子间相互作用对分子极化率的影响出发,研究了极性气体的第二克尔(Kerr)维里系数、分子间电荷转移络合物的 Raman 散射增强和表面增强 Raman 光谱(SERS)等三个方面的问题。

关键词: 分子间相互作用, 极化率, Kerr 效应, Raman 光谱。

物质的大多数光学性能取决于分子的极化率和超极化率,例如物质的折射率、旋光、Rayleigh 散射、Raman 散射、电光和磁光性能等。分子间作用力对于物质性质有着深刻影响,对于分子极化率及其有关的物质性能也是如此^[1-3]。本文从分子间相互作用对分子极化率的影响出发,讨论了极性气体的第二克尔(Kerr)维里系数、分子间电荷转移络合物的 Raman 散射增强和表面增强 Raman 光谱(SERS)等三个方面的问题。

1 极性气体的第二克尔(Kerr)维里系数 B_K

第二克尔维里系数 B_K 描述了真实气体的电致双折射性质(Kerr效应)的二级密度依赖关系。Buckingham 和 Pople 曾发展了第二克尔维里系数 B_K 的理论^[4,7],成功地解释了非极性气体的 B_K 值。但是,对于极性气体,他们的理论遇到了困难,长期以来,给不出正确的量级^[8]。

Kerr 效应产生于分子极化率的各向异性。这种各向异性有两个来源:一个是分子本身固有极化率的各向异性,另一个是分子间相互作用诱导的极化率各向异性。Buckingham 和 Pople 考虑了前者,忽略了后者。我们统一考虑了两者的贡献,提出了极性气体第二 Kerr 维里系数的理论,得到了与实验基本相符的结果^[5-6]。本文利用此理论,计算了 H_2S 气体第二 Kerr 维里系数 B_K 随温度的变化,进一步检验和分析了这一理论。

1.1 理论的基本内容

物质的电致双折射(Kerr效应)取决于折射率 n 的电场诱导各向异性,克分子 Kerr 常数定义为

1986年12月10日收到。

$$K_n = \frac{6nV_m}{(n^2+2)^2(\epsilon_0+2)^2} \lim_{E \rightarrow 0} \frac{n_{\parallel} - n_{\perp}}{E^2} \quad (1)$$

V_m 为克分子体积, ϵ_0 为介电常数, n_{\parallel} 和 n_{\perp} 分别是平行和垂直于电场方向的折射率. 将 K_n 展成 $\frac{1}{V_m}$ 的幂级数,

$$K_n = A_K + \frac{B_K}{V_m} + \frac{C_K}{V_m^2} + \dots \quad (2)$$

从而定义了第二 Kerr 维里系数 B_K . 借助于 Lorentz-Lorenz 关系, 物质的折射率由其组成分子的极化率 $\pi_{\parallel}, \pi_{\perp}$ 来确定. 分子固有极化率给出了 Buckingham 理论的第二 Kerr 维里系数 B'_K , 而一对分子相互作用产生的诱导极化率给第二 Kerr 维里系数以额外的贡献 ΔB_K .

$$B_K = B'_K + \Delta B_K \quad (3)$$

由于分子相互作用产生的 ΔB_K 可以表示为

$$\Delta B_K = \frac{2\pi^2 N^2}{27KT} \left[\langle (\Delta\pi_{\parallel} - \Delta\pi_{\perp}) \alpha_{\pm}^{(1)} \rangle_{E \rightarrow 0} + \frac{1}{2KT} \langle (\Delta\pi_{\parallel} - \Delta\pi_{\perp}) \mu_{\pm}^{(2)} \rangle_{E \rightarrow 0} \right] \quad (4)$$

其中 N 为阿伏加德罗常数, $\Delta\pi_{\parallel}, \Delta\pi_{\perp}$ 为分子的光场极化率的碰撞诱导增量, $\alpha_{\pm}^{(1)}$ 为一对分子的低频极化率分量, $\mu_{\pm}^{(2)}$ 为一对分子的偶极矩分量,

$$\Delta\pi_{\alpha\beta} = 2\alpha_1\alpha_2 T_{\alpha\beta} \quad (5)$$

$$\mu_{\pm}^{(2)} = \mu_{\pm 0}^{(1)} + \mu_{\pm 0}^{(2)} + \alpha(\mu_{\beta 0}^{(1)} + \mu_{\beta 0}^{(2)}) T_{\alpha\beta} \quad (6)$$

而 $T_{\alpha\beta} = \nabla_{\alpha} \nabla_{\beta} r^{-1}$. 式 (4) 中符号 $\langle \quad \rangle_{E \rightarrow 0}$ 表示统计平均,

$$\langle x \rangle_{E \rightarrow 0} = \frac{1}{4\pi Q_1 Q_2} \int \int x \exp\left[-\frac{u^{(1)}}{KT}\right] \sin\theta d\theta d\varphi d\hat{\omega}_1 d\hat{\omega}_2 r^2 dr \quad (7)$$

其中 $u^{(1)}$ 为一对分子相互作用能, 这里采用 Stockmayer 势,

$$u^{(1)} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - \frac{\mu^2}{r^3} [2\cos\theta_1 \cos\theta_2 - \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi] \quad (8)$$

将 (5) — (8) 式代入 (4) 式进行较繁的数学推演, 得到基本理论公式

$$\Delta B_K = \frac{2\pi^2 N^2}{405(KT)^2} \frac{\alpha^2 \mu^2}{\sigma^3} y^{-6} H_2(y) \left[4 + \frac{2}{3} \frac{\mu^2}{KT} \frac{1}{\alpha} + \frac{2}{21} \frac{H_2(y)}{H_2(y)} \frac{\mu^2}{KT} \frac{1}{\sigma^3} \right] \quad (9)$$

其中 $y = 2\left(\frac{\epsilon}{KT}\right)^{\frac{1}{2}} = 2\left(\frac{\Theta_L}{T}\right)^{\frac{1}{2}}$, 函数 $H_2(y) = y^{\frac{\pi-n}{\nu}} \sum_{p=0}^{\infty} \Gamma\left(\frac{6p+n-3}{12}\right) \frac{y^p}{p!}$

已被 Buckingham 和 Pople 计算列表^[7].

1.2 极性气体 CH₃F、CH₂F₂、CHF₃ 的计算结果

采用文献中常用的分子参数 (具体出处见[6]), 极性气体 CH₃F、CH₂F₂ 和 CHF₃ 的第二 Kerr 维里系数计算值列于表 1 中, 同实验值基本相符.

1.3 极性气体 H₂S 的第二 Kerr 维里系数随温度的变化

选用 H₂S 的常用分子参数 $\mu = 0.974 \times 10^{-18}$ e.s.u., $\alpha = 4.20 \times 10^{-24}$ e.s.u. 和可调参数 $\Theta_L = 350^\circ\text{K}$, $\sigma = 2.96 \text{ \AA}$. 按 Buckingham 和 Pople 理论的计算值 $B'_K = -0.1 \times 10^{-12}$ e.s.u.

与实验值符号相反,且小了4个量级,可以略去。分子相互作用诱导极化率的贡献 ΔB_K 随温度变化计算值列于表2中,同实验结果基本相符。(实验值取自文献[8])。

表 1

物质	$\Theta_j = \frac{6}{K}$ (°K)	σ (Å)	$\alpha \times 10^{24}$ (cm ³)	K_a	$\mu \times 10^{18}$ (e.s.u.)	$E'_K \times 10^{12}$ (e.s.u.)	$\Delta B_K \times 10^{12}$ (e.s.u.)	$B_K \times 10^{12}$ (理论)	$B_K \times 10^{12}$ (实验)
CHF ₃	144	3.42	3.51	0.0289	1.65	335	3432	3767	3325.4 ±1660
CH ₂ F ₂	174.5	3.38	3.22	0.055	1.97	2618	4586	7204	6116.6 ±600
CH ₃ F	205	3.33	2.81	0.026	1.81	622.2	2995	3617	4584 ±2300

表 2

温 度 T(°K)	253.9	265.8	275.8	289.0	304.2	316.8	340.6
$\Delta B_K(T)$ (理论) $\times 10^{12}$ e.s.u.	3464	2961	2585	2221	1924	1650	1343
B_K (实验) $\times 10^{12}$ e.s.u.	3582 ±179	3033 ±150	2700 ±135	2196 ±110	1674 ±83.7	1539 ±75	1314 ±65

1.4 讨论

(i) 从1.2、1.3的计算结果可知,碰撞诱导极化率是极性气体的第二Kerr维里系数主要贡献者,它给 B_K 以正值,且比分子固有极化率的贡献大几个量级。理论计算值同实验值基本相符,从而解决了长期存在的理论同实验的矛盾。

(ii) 从1.3中可知, H₂S 分子参数 σ 选用 2.96 Å, 明显偏低。关于这种缺点,文献[1]曾就极性气体压力维里系数的计算,作过深刻的分析。看来,本理论处理分子自转和分子间相互作用指向势的藕合及其统计计算方面尚需进一步发展。

2 分子间电荷转移络合物的 Raman 散射增强

近年来发现,吸附于贵金属表面分子的 Raman 散射截面比自由分子增大约 10^6 倍,这种现象称之为表面增强 Raman 散射(SERS)。自从 SERS 发现以来,其增强机理便成为激烈争论和讨论的课题,但是至今仍无统一的结论^[9]。前些年发现的分子间电荷转移络合物的 Raman 散射增强,从一个侧面揭示了 SERS 效应的本质,本文提出了其强度和偏振比的理论解释。

2.1 Raman 光谱强度的基态极化率理论

按照 Raman 光谱强度的基态极化率理论^[11],对于平面偏振入射光、同入射光垂直的 Raman 散射强度,可以用分子的导出极化率来表示

$$I_p = \text{const} \cdot \frac{1}{45} [45(\alpha')^2 + 13(\gamma')^2] \quad (10)$$

退偏振比为

$$\rho_p = \frac{3\gamma'^2}{45(\alpha')^2 + 4\gamma'^2} \quad (11)$$

这里 α' 是平均极化率 α 的偏导数 $\left(\frac{\partial\alpha}{\partial q}\right)_{q_0}$, γ' 是各向异性极化率的偏导数 $\left(\frac{\partial\gamma}{\partial q}\right)_{q_0}$, q 为分子振动的简正坐标. Tang 和 Albrecht 给出了分子导出极化率 α' 的近似表达式^[11]

$$\alpha'_{\rho\sigma} \equiv \left(\frac{\partial\alpha_{\rho\sigma}}{\partial q}\right)_{q_0} = 2\alpha_{\rho\sigma}^0 \frac{\left[\frac{\partial}{\partial q}\langle g|M_{\rho}M_{\sigma}|g\rangle\right]_{q_0}}{\langle g|M_{\rho}M_{\sigma}|g\rangle_{q_0}} \quad (12)$$

这里 M_{ρ} , M_{σ} 为偶极矩分量, $|g\rangle$ 为分子基电子态.

2.2 分子间电荷转移络合物

由 Mulliken 电荷转移理论, 分子间电荷转移络合物的基态为

$$\psi_g = a\psi_0(D, A) + b\psi_1(D^+, A^-)$$

$\psi_0(D, A)$ 态表示分子 D 和 A 间没有成键, $\psi_1(D^+, A^-)$ 态表示给体分子 D 的一个电子迁移到了受体分子 A 上, D^+ 和 A^- 间生成了络合键. 将 ψ_g 代入 (12) 式, 利用众所周知的 Mulliken 集居数分析和近似, 得到分子间电荷转移络合物的导出极化率为

$$\alpha'_{\rho\sigma} = \alpha_{\rho\sigma}^0 + A_{\rho\sigma}\Delta Q + B_{\rho\sigma}\Delta Q' \quad (13)$$

式中第一项是不存在电荷转移时分子间络合物的导出极化率, 它等于自由分子导出极化率、偶极—诱导偶极导出极化率之和. 第二项 $A_{\rho\sigma}\Delta Q$ 表示由于电荷转移 (ΔQ) 引起电荷重新分布, 使得导出极化率增加. 第三项 $B_{\rho\sigma}\Delta Q'$ 表示电荷迁移量随着分子振动而变化 ($\Delta Q' \equiv \frac{\partial\Delta Q}{\partial q}$), 导致导出极化率的增加. 系数 $A_{\rho\sigma}$ 、 $B_{\rho\sigma}$ 分别为

$$A_{\rho\sigma} = \frac{2\alpha_{\rho\sigma}^0}{\langle \psi_0 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_0 \rangle} \left(\frac{\partial M_{\rho\sigma}}{\partial q}\right)_{q_0} = (\alpha'_{\rho\sigma})_{D^+A^-} - \frac{\langle \psi_0 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_1 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_1 \rangle} - \alpha_{\rho\sigma}^0 \quad (14)$$

$$B_{\rho\sigma} = \frac{2\alpha_{\rho\sigma}^0}{\langle \psi_0 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_0 \rangle} M_{\rho\sigma} = 2\alpha_{\rho\sigma}^0 \left[\frac{\langle \psi_1 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_0 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_0 \rangle} - 1 \right] \quad (15)$$

其中

$$M_{\rho\sigma} = \langle \psi_1 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_1 \rangle - \langle \psi_0 | M_{\rho} M_{\sigma} | \psi_0 \rangle \quad (16)$$

在 (13) 式基础上用 MS-X_a 方法计算了 C₅H₅N...Br₂ 和 NH₃...Br₂ 的 Raman 光谱增强^[10], 用近似方法计算了 14 个 Br₂...Py 的卤素、烷基取代衍生物系列的 Raman 增强和偏振化变化, 与实验结果基本相符.

2.4 讨论

如上推导采用了 Mulliken 电荷转移模型、Raman 强度理论的 δ 势模型等近似, 所得结果是半经验性的, 同实验十分好的符合有一定偶然性. 但是, 这一理论却揭示了电荷转移络合物 Raman 散射增强的物理起源. 式 (13) 表明, Raman 增强是由于电磁诱导、电荷转移和电荷转移随分子振动周期性变化等三个因素, 导致相互作用体系导出极化率的增加和 Raman 光散射的增强, 其中第三个因素最重要. 上述理论可以定性说明表面增强 Raman (SERS) 的主要特征, 同我们的有关实验结果在定性上是一致的^[12-17].

3 表面增强 Raman 光谱 (SERS)

近十年来,关于表面增强 Raman 光谱 (SERS) 的机理进行了强烈地研究和激烈地争论. 渐趋一致的看法是: SERS 是电磁增强和分子增强 (或化学增强) 共同作用的结果. 对于前者已有较清楚的认识, 对于后者仍然存在着严重的分歧, 其实质还远没有搞清^[9]. 入射激光束照射在吸附于金属表面的分子上, 产生诱导分子偶极矩 μ_{RS} , 从而辐射 Raman 光子,

$$\mu_{RS} = \alpha_{RS} \cdot E_i(r; \omega) \exp[-i(\omega - \omega_0)t]$$

这里, α_{RS} 是 Raman-Stokes 极化率, $E_i(r; \omega)$ 是局部场强, ω 和 ω_0 分别是入射光频率和分子振动频率. 当入射激光或 Raman 散射光频率接近金属表面等离子体共振频率时, 局部场 E_i 极大地增加, 产生电磁增强. 金属表面和分子相互作用, 极大地增加了吸附分子诱导极化率 α_{RS} , 产生了化学增强 (分子增强). 已提出的分子增强的机制很多, 我们的实验结果支持电荷转移模型, 下面利用本文前节中的观点, 定性解释这些实验事实.

3.1 SERS 增强同分子振型的关系

按照电荷转移模型, 同一分子的不同简正振型, 对电荷转移有不同的影响, 因而 SERS 增强大小亦应不同. 如式 (13) 所指明的, $\left(\frac{\partial \Delta Q}{\partial q}\right)$ 越大, Raman 散射就越强. 即随着分子

振动, 电荷转移量变化越大, 表面增强 Raman 光谱越强. 苯甲酸分子吸附于银胶上的 SERS 光谱表明^[12]: 在苯甲酸的各种振型的 SERS 增强中, 保持分子在同一平面内的振动谱带, 如 839cm^{-1} , 1001cm^{-1} 和 1600cm^{-1} , 有较大的增强; 而其他带增强较小或消失. 这是因为苯甲酸分子按这些模式振动时, 保持分子的平面结构, 不破坏分子的大 π 键, 有利于电荷转移, 对电荷转移影响大, 因而 SERS 强度增加较多; 而非平面分子振动破坏了分子共轭大 π 键, 不利于电荷转移, 故其谱线强度增强较小或消失.

3.2 SERS 增强同分子结构的关系

我们曾比较了系列化合物 $\text{C}_6\text{H}_5(\text{CH}_2)_n\text{COOH}$ ($n=0, 1, 2$) 的 SERS 谱^[13], 实验发现: $-\text{COO}^-$ 对称伸缩带 (ν_s) 和苯环呼吸振动带 (ν_a) 的强度比, $f = \frac{I_{\nu_s}}{I_{\nu_a}}$, 从 $n=0$ 到

$n=1, 2$ 有着明显的增加 (表 3). 这有力地支持了电荷转移的观点: 当 $n=0$ 时, 苯甲酸

($\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$) 中苯环和 $-\text{COO}^-$ 可形成一个统一的共轭大 π 键, COO^- 和苯环上的 P_x 电子为整个分子所共享, 这样一方面减弱了 COO^- 同金属底物的电荷转移, 另一方面增强了苯环同金属底物的电荷转移. 前者使 I_{ν_s} 减小, 后者使 I_{ν_a} 增大, 从而使 $f = I_{\nu_s}/I_{\nu_a}$ 数值变小. 但是,

当 $n=1, 2$ 时 (苯乙酸和 β -苯丙酸), 由于苯环和 $-\text{COOH}$ 中间的饱和 $-\text{CH}_2-$ 基团的存在, 破坏了苯环和 $-\text{COO}$ 基团的共轭大 π 键, 从而大大削弱了苯环和金属间的电荷转移, 并加强了 $-\text{COOH}$ 和金属间的电荷转移. 前者使 I_{ν_a} 降低, 后者使 I_{ν_s} 增加, 故比值

表 3

分 子	比值 $f = I_{\nu_s}/I_{\nu_a}$
$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$	0.2(SERS)
$\text{C}_6\text{H}_5 \cdot \text{CH}_2 \cdot \text{COOH}$	3.6(SERS)
$\text{C}_6\text{H}_5 \cdot (\text{CH}_2)_2 \cdot \text{COOH}$	2.5(SERS)

$f = I_s / I_0$ 明显大于苯甲酸。

3.3 SERS 增强同激光频率的关系

SERS 增强随着入射激光频率而变化,称为激发谱。实验发现^[14],不同的化合物共吸附在同一底物上,它们的激发谱是不同的。例如,吡啶、邻硝基苯酸和非晶碳共吸附于同一银胶上,它们的激发谱明显不同,激发谱峰值相应的频率分别是:吡啶,630nm;邻硝基苯酸,580nm;非晶碳,450nm。又如水杨酸和增感染料 1555 共吸附在银胶上,其激发谱峰值相应频率为:水杨酸,600nm;染料—1555,550nm。按照电磁机理,同一银胶,等离子体激发频率相同,共吸附分子应该有相同的激发谱。如上的实验事实清楚地表明,分子增强机理是必不可少的。

通常金属的等离子体共振频率 ω_p 正比于自由电子密度 n 的平方根,例如

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}$$

上述共吸附分子通过含孤对电子的原子 O、N 等与金属发生电荷转移相互作用。含孤对电子原子转移给金属的电荷越多,对等离子体激发频率的调制就越大 ($\Delta\omega \propto \Delta\sqrt{n}$),SERS 激发谱的峰值向短波长移动也就越多。于是,共吸附分子 SERS 激发谱峰值的顺序(从长波向短波)应该与配位络合物中的光谱化学系列(由弱到强)相一致。事实上,吡啶、邻硝基苯酸、非晶碳的激发谱峰值顺序跟光谱化学系列是一致的。对于水杨酸和染料 1555 也是如此^[16]。

3.4 SERS 增强与吸附底物的关系

现已发现有表面增强 Raman 散射(SERS)效应的底物主要是 Ag、Cu、Au 等贵金属。我们曾发现吸附在 AgCl^[15]、AgBr^[16] 等胶体上的分子也有强的表面增强效应(SERS)。实验鉴定其增强根源^[17],除了电磁增强外,吸附分子和银离子形成的络合物起着重要作用。对于半导体 AgCl、AgBr 上的 SERS,电荷转移相互作用更是不可缺少的。

4 结语

分子间相互作用产生诱导分子极化率,深刻地影响着物质的电光性能和光散射行为。

本文第三部分的理论分析是建立在我们研究组实验结果基础上的,对于本组其他同志的辛勤劳动和热情帮助,深表谢意。

参 考 文 献

- [1] 钱学森,物理力学讲义,科学出版社,北京,1962年,第八、九、十一章。
- [2] Buckingham, A. D., Liu Fan-chen, *International Reviews in Physical Chemistry*, 1 (1981), 253.
- [3] Buckingham, A. D., *Pure Appl. Chem.*, 52 (1980), 253.
- [4] Buckingham, A. D., *Proc. Phys. Soc. London*, 68 (1955), 910.
- [5] Buckingham, A. D., Liu Fan-chen et al., *J. Mol. Structure*, 100(1983), 3.
- [6] 刘凡镇,科学探索,4 (1984), 55.
- [7] Buckingham, A. D., Pople, J. A., *Trans. Faraday Soc.*, 51 (1955), 1029, 1173, 1179.

- [8] Bogaard, M. P., Buckingham, A. D. et al., *Chem. Phys. Lett.*, 90 (1982), 183.
- [9] Moskovits, M., *Rev. Mod. Phys.*, 57 (1985), 783.
- [10] 李俊清, 万超志, 刘凡镇等, 中国科技大学学报, 14 (1984), 501.
- [11] Tang, T., Albrecht, A. C., *Raman Spectroscopy* (Ed. by Szymansky, H. A.), Plenum, New York, 1970.
- [12] Wan Chaozhi, He Tianjing, Liu Fan-Chen et al., *J. Mol. Sci.*, 3 (1985), 95.
- [13] Wan Chaozhi, He Tianjing, Liu Fan-Chen et al., *J. Mol. Structure*, 140 (1986), 227.
- [14] Gao Xiaoping, Liu Fan-chen, Xin Houwen et al., Proceeding of Nanjing International Conference on Raman Spectroscopy, Nanjing, 1984, 31-1.
- [15] Gao Xiaoping, Liu Fan-chen et al., *Chem. Phys. Lett.*, 112 (1984), 465.
- [16] Wang Jian, Liu Fan-chen et al., *Spectrochimica Acta*, 43A (1987), 375.
- [17] Li Dawei, Liu Fan-chen et al., *Spectrochimica Acta*, 43A (1987), 379.
- [18] 何福成, 朱正和, 结构化学, 人民教育出版社, 1979年, 186.

Polarizabilities of Interacting Systems

Liu Fanchen Xin Houwin
(Department of Modern Chemistry)

Abstract

From point of view of the effect of intermolecular interaction on polarizabilities of molecules, three problems are studied in this paper: (i) the second Kerr virial coefficient of polar gases; (ii) the enhanced Raman scattering of intermolecular charge-transfer complexes; (iii) the surface enhanced Raman spectra (SERS).

Key words: intermolecular interaction, molecular polarizability, Kerr effect, Raman spectra.

关于 Morison 方程中耦合项的研究

卢耘耘 王秀喜

(近代力学系)

摘 要

本文以简化为悬臂柱体的近海结构为例,用 Airy 线性波理论和 Morison 方程分析了它的动力响应。Morison 方程中的流固耦合项用三种不同方法处理,详细比较了其耦合项在不同条件下对结构响应的影响。计算结果表明,用不同的方法处理 Morison 方程可能会导致结果的较大差别。这对于工程应用,有一定的参考价值。

关键词: 近海结构, 流固耦合, 动力响应。

1 引言

无论是用确定性方法还是统计方法分析海洋结构的动力响应,首先要正确计算作用在结构上的外载荷。引起结构疲劳及断裂的主要外载是海浪载荷^[1,2]。迄今为止,计算海浪载荷最常用的公式是 Morison 方程。虽然它只是计算圆柱波载的半经验公式,但在工程中却被广泛应用。由于 Morison 方程中包含有流体与非线性耦合项,给最后求解运动方程带来一定的困难。因此,通常都采取一些简化方法处理 Morison 方程:或者假设流体与固体的耦合效应很小,从而忽略耦合项不计;或者假设水质点速度远远大于结构响应的速度,而略去结构响应速度的平方项^[3,4]。显然,前一种处理方法没有反映流固耦合对海洋结构动力响应的影响,而后一种处理方法也必然影响了这种耦合效应的反映。就我们所知,这两种处理方法对直接求解包括流固耦合项的 Morison 方程,究竟有多大影响,还不十分清楚,特别是缺乏一些定量结果。

本文把海洋平台简化为一个悬臂柱体,从 Hamilton 原理出发,并假定悬臂柱体的挠曲函数,从而把结构化为一个广义单自由度系统。用 Airy 线性波理论和几种不同的方法处理 Morison 方程,形成波浪对悬臂柱体的载荷,最后得到的动力方程,可以精确求出解析解或数值解,从而能够详细比较方程中流固耦合项的舍留对结构响应的影响,以及系统参数、

1986年5月24日收到。

* 中国科学院科学基金资助课题。

海况对这种耦合效应的影响。所得结果，对海洋结构的设计及工程应用，有一定的参考价值。

2 问题的提法和求解

如图 1 所示的悬臂柱体，设抗弯刚度为 EI ，结构阻尼为 C ，柱体单位长度的质量为 m (y)，顶端带有集中质量 M ，该柱体在外载荷 $F(x)$ 作用下的动能为 T ，弯曲变形能为 V ，作用于系统上的非保守力所作的功为 W_e ，在指定的时间区间 (t_1, t_2) 取变分 δ ，则由 Hamilton 原理^[5]，有

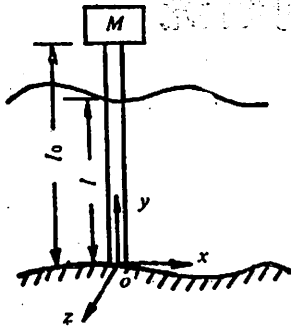


图 1 简化为悬臂柱体的结构物

$$\int_{t_1}^{t_2} \delta(T - V) dt + \int_{t_1}^{t_2} \delta W_e dt = 0 \quad (1)$$

其中

$$T = \frac{1}{2} \int_0^{l_0} m(y) [\dot{W}(y, t)]^2 dy$$

$$V = \frac{1}{2} \int_0^{l_0} EI [W''(y, t)]^2 dy$$

$$\delta W_e = \int_0^{l_0} [F(y, t) - C\dot{W}(y, t)] \delta W(y, t) dy$$

式中 $W(y, t)$ 为柱体中心线的挠度，并且

$$\dot{W}(y, t) = \frac{\partial W}{\partial t}, \quad W'(y, t) = \frac{\partial W}{\partial y}, \quad W''(y, t) = \frac{\partial^2 W}{\partial y^2}$$

2.1 运动方程

设该悬臂柱体在波浪载荷作用下仅能产生单一的变形形式，于是可将其简化为单自由度系统。取挠曲形状函数为 $\psi(y)$ ，运动的振幅用广义坐标 $X(t)$ 表示，则

$$W(y, t) = \psi(y) X(t)$$

将以上各式，代入 (1) 式，可得

$$M^* \ddot{X}(t) + C^* \dot{X}(t) = K^* X(t) = F^*(t) \quad (2)$$

式中

$$M^* = \int_0^{l_0} m(y) \psi^2(y) dy + M \psi^2(y) \Big|_{y=l_0} \quad (3)$$

$$C^* = \int_0^{l_0} C \psi^2(y) dy \quad (4)$$

$$K^* = \int_0^{l_0} EI [\psi''(y)]^2 dy \quad (5)$$

$$F^*(t) = \int_0^{l_0} F(y, t) \psi(y) dy \quad (6)$$

取挠曲形状函数

$$\psi(y) = 1 - \cos \frac{\pi y}{2l_0} \quad (7)$$

它满足柱体底部及端点边界条件。由于柱体水下部分往往装有海水，可用等效质量密度表示。

令

$$m(y) = \begin{cases} m_2 & \text{水上部分 } (l < y \leq l_0) \\ m_1 & \text{水下部分 } (0 \leq y \leq l) \end{cases}$$

于是

$$M^* = m_1 \left(\frac{3l}{2} - \frac{4l_0}{\pi} \sin \frac{\pi l}{2l_0} + \frac{l_0}{2\pi} \sin \frac{\pi l}{l_0} \right) + m_2 \left[\frac{3}{2}(l_0 - l) - \frac{4l_0}{\pi} \right. \\ \left. + \frac{4l_0}{\pi} \sin \frac{\pi l}{2l_0} - \frac{l_0}{2\pi} \sin \frac{\pi l}{l_0} \right] + M \quad (8)$$

$$C^* = Cl_0 \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi} \right) \quad (9)$$

$$K^* = \frac{EI\pi^4}{32l_0^3} \quad (10)$$

M^* , C^* 及 K^* 分别为广义质量，广义阻尼和广义刚度。

2.2 海浪载荷计算

由 Morison 方程，作用在该柱体上的波浪力为^[6, 7]

$$F(y, t) = \rho A \ddot{z} + \rho(C_m - 1)A(\ddot{z} - \ddot{W}) + \frac{1}{2}\rho C_d D |\dot{z} - \dot{W}|(\dot{z} - \dot{W}), 0 \leq y \leq l \quad (11)$$

D = 悬臂柱体直径； A = 柱体的横截面积； ρ = 海水密度； C_m = 惯性力系数； C_d = 阻力系数； \dot{z} 和 \ddot{z} 分别为水质点速度及加速度。由 Airy 线性波理论，水深 y 处的水质点速度及加速度为^[8]

$$\dot{z} = a \operatorname{Ch}(ky) \cos(kx - \omega t)$$

$$\ddot{z} = a\omega \operatorname{Ch}(ky) \sin(kx - \omega t)$$

当 $x=0$ 时，有

$$\dot{z} = a \operatorname{Ch}(ky) \cos \omega t$$

$$\ddot{z} = -a\omega \operatorname{Ch}(ky) \sin \omega t \quad (12)$$

$a = \frac{\omega H}{2 \operatorname{sh}(kd)}$ 为水质点速度系数， d 为水深， L 为波长， ω 为为海浪圆角频率， H 为波幅，

$k = \frac{2\pi}{L}$ 为波数。

将 (12) 式代入 (11) 式，可求出 $F(y, t)$ ，但由于耦合项 $\ddot{z} - \ddot{W}$ 的存在，给求解复杂结构运动方程带来一定的困难，但简化成单自由度系统后，就不难求解了。为了比较耦合项对结构响应的影响，尽可能合理地应用 Morison 方程，我们用以下三种方式处理 Morison 方程：

a) 假设水质点速度远远大于结构响应的速度^[9]，即 $|\dot{z}| \gg |\dot{W}|$ ，则在展开方程 (11) 中速度的平方项后，可将响应速度的平方项 \dot{W}^2 略去，

$$|\dot{u} - \dot{W}|(\dot{u} - \dot{W}) \approx |\dot{u}| \dot{u} - 2|\dot{u}| \dot{W} \quad (13)$$

方程(2)中与 $2|\dot{u}| \dot{W}$ 相关的项移到方程左边即为附加阻尼,但 $|\dot{u}|$ 是时间的函数,为了运算方便,通常用它在时间域上的均值代替,即

$$2|\dot{u}| \dot{W} \approx 2\langle |\dot{u}| \rangle \dot{W} \quad (14)$$

符号 $\langle \rangle$ 表示在水波一个周期内的均值。于是

$$\langle |\dot{u}| \rangle = \frac{H\omega}{2\text{sh}(kd)} \text{ch}(ky) \langle |\cos \omega t| \rangle = \frac{\omega H \text{ch}(ky)}{\pi \text{sh}(kd)} \quad (15)$$

这是目前最为普遍的一种对Morison方程处理方法^[6],在本文中简称为耦合近似法。将(13), (14)式代入(11)式,有

$$F(y, t) = \rho AC_m \ddot{u} - \rho A(C_m - 1)W + \frac{1}{2} \rho C_d D |\dot{u}| \dot{u} - \rho C_d D \langle |\dot{u}| \rangle \dot{W} \quad (16)$$

由(6)式,代入有关各式,并整理得附加质量,附加阻尼及波浪载荷

$$M_{*d} = \rho(C_m - 1)A \left[\frac{3l}{2} - \frac{4l_0}{\pi} \sin \frac{\pi l}{2l_0} + \frac{l_0}{2\pi} \sin \frac{\pi l}{l_0} \right] \quad (17)$$

$$C_{*d} = \frac{\rho \omega H C_d D}{\pi \text{sh}(kd)} \left[\frac{3}{2k} \text{sh}(kl) - \frac{\frac{\pi}{l_0} \sin \frac{\pi l}{2l_0} \text{ch}(kl) + 2k \text{sh}(kl) \cos \frac{\pi l}{2l_0}}{k^2 + \left(\frac{\pi}{2l_0}\right)^2} + \frac{k \text{sh}(kl) \cos \frac{\pi l}{l_0} + \frac{\pi}{l_0} \sin \frac{\pi l}{l_0} \text{ch}(kl)}{2k^2 + 2\left(\frac{\pi}{l_0}\right)^2} \right] \quad (18)$$

$$\begin{aligned} F^*(t) &= \int_0^l \rho AC_m \ddot{\psi}(y) dy + \frac{1}{2} \int_0^l \rho C_d D \dot{u} |\dot{u}| \psi(y) dy \\ &= F_1 \sin \omega t + F_2 |\cos \omega t| \cos \omega t \end{aligned} \quad (19)$$

式中

$$F_1 = -\rho AC_m \frac{\omega H}{2\text{sh}(kd)} \left[\frac{1}{k} \text{sh}(kl) - \frac{\frac{\pi}{2l_0} \sin \frac{\pi l}{2l_0} \text{ch}(kl) + k \cos \frac{\pi l}{2l_0} \text{sh}(kl)}{k^2 + \left(\frac{\pi}{2l_0}\right)^2} \right]$$

$$F_2 = \frac{1}{4} \rho C_d D \left[\frac{\omega H}{2\text{sh}(kd)} \right]^2 \left[l + \frac{\text{sh}(2kl)}{2k} - \frac{2l_0}{\pi} \sin \frac{\pi l}{2l_0} - \frac{2k \text{sh}(2kl) \cos \frac{\pi l}{2l_0} + \frac{\pi}{2l_0} \sin \frac{\pi l}{2l_0} \text{ch}(2kl)}{4k^2 + \left(\frac{\pi}{2l_0}\right)^2} \right]$$

代入(2)式有

$$(M^* + M_{s,d}^*)\ddot{X} + (C^* + C_{s,d}^*)\dot{X} + K^*X = F_1 \sin \omega t + F_2 |\cos \omega t| \cos \omega t \quad (20)$$

该方程能求出解析解，令

$$A^* = \frac{F_1}{M^* + M_{s,d}^*}, \quad B^* = \frac{F_2}{M^* + M_{s,d}^*}$$

$$\omega_n^2 = \frac{K^*}{M^* + M_{s,d}^*}, \quad 2\xi^* \omega_n = \frac{C^* + C_{s,d}^*}{M^* + M_{s,d}^*}$$

ω_n 即为该柱体近似固有频率， ξ^* 为广义阻尼比。于是有

$$\ddot{X} + 2\xi^* \omega_n \dot{X} + \omega_n^2 X = A^* \sin \omega t + B^* |\cos \omega t| \cos \omega t \quad (21)$$

此方程的解为

$$X_1(t) = A_1 \sin \omega t + A_2 \cos \omega t + A_3 \cos 2\omega t + A_4 \sin 2\omega t$$

$$+ A_5 + A_6 e^{-\xi^* \omega_n t} \cos \omega_n t, \quad A_7 e^{-\xi^* \omega_n t} \sin \omega_n t, \quad \cos \omega t > 0$$

$$X_2(t) = A_1 \sin \omega t + A_2 \cos \omega t - A_3 \cos 2\omega t - A_4 \sin 2\omega t$$

$$- A_5 + B_6 e^{-\xi^* \omega_n t} \cos \omega_n t + B_7 e^{-\xi^* \omega_n t} \sin \omega_n t, \quad \cos \omega t < 0 \quad (22)$$

式中

$$A_1 = \frac{A^*}{\omega_n^2} [(1 - \beta^2)^2 + (2\xi^* \beta)^2]^{-1} (1 - \beta^2)$$

$$A_2 = -\frac{2A^* \xi^* \beta}{\omega_n^2} [(1 - \beta^2)^2 + (2\xi^* \beta)^2]^{-1}$$

$$A_3 = \frac{B^*}{2\omega_n^2} [(1 - 4\beta^2)^2 + (4\xi^* \beta)^2]^{-1} (1 - 4\beta^2) \quad (23)$$

$$A_4 = -\frac{2\xi^* B^* \beta}{\omega_n^2} [(1 - 4\beta^2)^2 + (4\xi^* \beta)^2]^{-1}$$

$$A_5 = \frac{B^*}{2\omega_n^2}$$

这里

$$\beta = \omega / \omega_n$$

系数 A_1, A_2, B_6 及 B_7 可如下确定：

当 $t=0$ 时， $\cos \omega t > 0$ ， $X_1(0) = 0$ ， $\dot{X}_1(0) = 0$ ，于是

$$A_5 = -A_2 - A_3 - A_4 \quad (24)$$

$$A_7 = -\beta(A_1 + 2A_3) - \xi^*(A_2 + A_3 + A_4)$$

$\cos \omega t_n = 0$ ，即 $t_n = \frac{\pi}{\omega} \left(m + \frac{1}{2} \right)$ ， $m = 0, 1, 2, \dots$ ，有连续条件 $X_1(t_n) = X_2(t_n)$ ， $\dot{X}_1(t_n)$

$= \dot{X}_2(t_n)$ 。因此， $\frac{\pi}{\omega} \left(m + \frac{1}{2} \right) \leq t \leq \frac{\pi}{\omega} \left(m + 1 + \frac{1}{2} \right)$ ， $m = 0, 2, 4, \dots$ ，时有

$$B_6 = A_5 + 2e^{\xi^* \omega_n t_n} (A_5 - A_3) (\cos \omega_n t_n - \xi^* \sin \omega_n t_n)$$

$$- 2\beta A_4 e^{\xi^* \omega_n t_n} \cos 2\omega t_n \sin \omega_n t_n$$

$$B_7 = A_7 + 2e^{\xi^* \omega_n t_m} (A_5 - A_3) (\sin \omega_n t_m + \xi^* \cos \omega_n t_m)$$

$$+ 2\beta A_4 e^{\xi^* \omega_n t_m} \cos 2\omega_n t_m \cos \omega_n t_m$$

当 $\frac{\pi}{\omega} \left(m + \frac{1}{2} \right) \leq t \leq \frac{\pi}{\omega} \left(m + 1 + \frac{1}{2} \right)$, $m = 1, 3, 5, \dots$, 时有

$$A_6 = B_6 - 2e^{\xi^* \omega_n t_m} (A_5 - A_3) (\cos \omega_n t_m - \xi^* \sin \omega_n t_m)$$

$$+ 2\beta A_4 e^{\xi^* \omega_n t_m} \cos 2\omega_n t_m \sin \omega_n t_m \quad (26)$$

$$A_7 = B_7 - 2e^{\xi^* \omega_n t_m} (A_5 - A_3) (\sin \omega_n t_m + \xi^* \cos \omega_n t_m)$$

$$- 2\beta A_4 e^{\xi^* \omega_n t_m} \cos 2\omega_n t_m \cos \omega_n t_m$$

(24)、(25) 及 (26) 式完全确定了系数 A_6 、 A_7 、 B_6 及 B_7 ，它们和 (23) 式一起，构成了方程 (21) 的完整解 X_1 及 X_2 。

b) 假设流体与固体耦合效应可忽略不计，由 (11) 式，可得^[7]

$$F(y, t) = \rho C_s A \ddot{u} + \frac{1}{2} \rho C_s D |\dot{u}| \dot{u}, \quad 0 \leq y \leq l \quad (27)$$

在上面的求解过程中，令 $C_{s,d}^* = 0$, $M_{s,d}^* = 0$,

$$\text{则} \quad \omega_s^* = \frac{K^*}{M^*}, \quad 2\xi^* \omega_s = \frac{C^*}{M^*} \quad (28)$$

广义力 $F^*(t)$ 仍然为 (19) 式，代入 (2) 式，得到的运动方程形式上同 (21) 式。方程的解 (22) 式及 (23) 式，对不考虑耦合项的方程，同样有效，只不过系数不同。注意到 (28) 式，此时，柱体的固有频率将增大。本文中将此方法简称为忽略耦合法。

c) 对 Morison 方程不作其它近似假设，直接把 (11) 式代入 (6) 式，整理后有附加质量 $M_{s,d}^*$ 不变，即为 (17) 式。利用对称性，广义力

$$\begin{aligned} F^*(t) &= 0.5 \rho C_s D \int_0^l |\dot{u} - \dot{W}| (\dot{u} - \dot{W}) \psi(y) dy \\ &= 0.25 \rho C_s D \int_{-l}^l |\dot{u} - \dot{W}| (\dot{u} - \dot{W}) \psi(y) dy \\ &= 0.25 \rho C_s D l \int_{-1}^1 |\dot{u}(z, t) - \dot{W}(lz, t)| [\dot{u}(lz, t) - \dot{W}(lz, t)] \psi(lz) dz \end{aligned}$$

采用 Gauss 数值积分，有

$$F^*(t) = \frac{1}{4} \rho C_s D l \sum_{k=1}^n \lambda_k f(z_k, t) \quad (29)$$

其中

$$\begin{aligned} f(z_k, t) &= \left| \operatorname{ach}(klz_k) \cos \omega t - \left(1 - \cos \frac{\pi lz_k}{2l_0} \right) \dot{X} \right| \\ &\quad \times \left[\operatorname{ach}(klz_k) \cos \omega t - \left(1 - \cos \frac{\pi lz_k}{2l_0} \right) \dot{X} \right] \left(1 - \cos \frac{\pi lz_k}{2l_0} \right) \end{aligned}$$

λ_i 是权重因子, n 是积分点数。本文中取 $n=6$, 则运动方程 (2) 为

$$(M_{**} + M^*)\ddot{X} + C^*\dot{X} + K^*X = \frac{1}{4}\rho C_d D l \sum_{k=1}^n \lambda_k f(z_k, t) \quad (30)$$

采用四阶精度 Runge-Kutta 法^[10], 最后求解此方程, 得到数值解。本文中简称该方法为完全耦合法。

3 计算结果及讨论

为了比较以上三种处理方法的差别, 我们计算了如图 1 所示的悬臂柱体动力响应, 图中

$$l_0 = 70\text{m}, l = 60\text{m}, m_1 = m_2 = 7.833 \times 10^3 \text{kg/m}^3$$

$$E = 201 \times 10^9 \text{N/m}^2, I = 1.686 \times 10^{-2} \text{m}^4, M = 1000\text{kg}, D = 0.762\text{m}.$$

无附加质量时的固有频率为 $\omega_n = 0.72199$ 。设计的海浪波幅 $H = 3\text{m}$, 当水深 $d = 60\text{m}$ 时, 波浪圆角频率在 $\omega = 0.2 \sim 1.2$ 范围内变化, 而形成不同的海况。所有的位移响应图中, 实线为忽略耦合时的结果, 点划线和虚线分别表示耦合近似法和完全耦合法的结果。所有的求解, 都是计算到响应达到稳定周期解时为止, 这大约出现在 $t > 50\text{s}$ 以后。图 2 示出的是 $C = 4.16$ 和 $C = 2.0$ 时, 由三种方法得到的最大位移随波浪圆角频率 ω 的变化曲线。在系统具有大阻尼时, 完全耦合法的响应值为最小, 当波浪圆角频率增大时, 完全耦合法的结果, 随着系统阻尼系数 C 的减小, 而渐渐大于用耦合近似法得到的结果, 这一转折点出现在 ω 约等于 0.70 时。类似的比较见图 3。此时三种方法的结果在共振点附近 ($\omega_n \approx 0.72$) 差别显著增大。同样的, 波浪圆角频率较小时, 耦合近似法的结果大于完全耦合法的结果; 随着波浪圆角频率增大, 结果正好相反。在所有的情况下, 不考虑耦合时, 得到的结果都是比较保守的估计。图 4 和图 5 分别给出了当 $c = 0.5$, $\omega = 0.6$ 及 $\omega = 0.8$ 时, 响应位移随时间变化曲线, 这是在 $\omega_n t > 110\text{s}$ 时情形。显然, 此时已达到了平稳状态。图中表明随着波浪圆角频率增大, 用通常的耦合近似方法处理 Morison 方程, 过低估计了结构的动力响应。另一方面, 工程中通常感兴趣的是共振点附近结构的动力响应。图 6 示出了波浪圆角频率接近结构谐振频率 ($\omega = 0.8$) 时, 响应位移随着结构阻尼系数变化曲线, 三种方法的差别较为

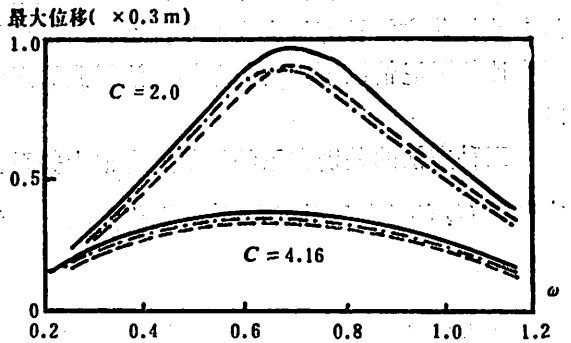


图 2 最大位移随波浪频率变化

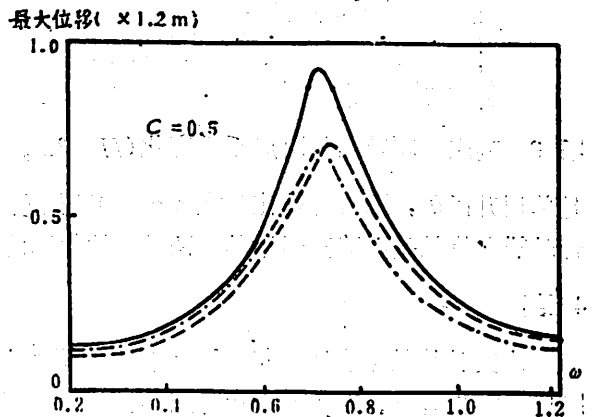


图 3 最大位移随波浪频率变化

结构谐振频率 ($\omega = 0.8$) 时, 响应位移随着结构阻尼系数变化曲线, 三种方法的差别较为

显著。特别注意到通常的结构都是具有小阻尼，本例中 $c = 0.2 \sim 2.0$ ，这是工程中通常采用

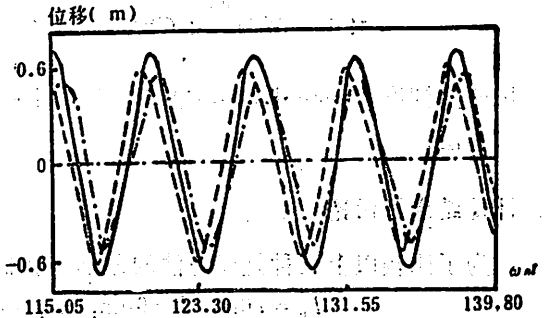
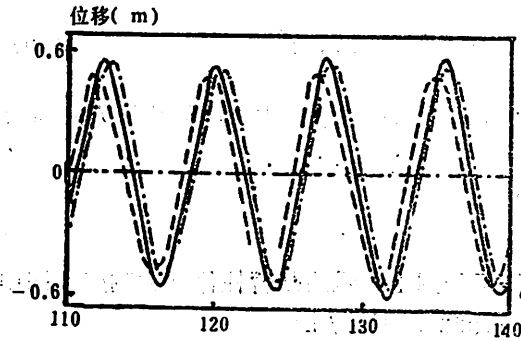


图 4 响应位移随时间变化 ($c = 0.5, \omega = 0.6$) 图 5 响应位移随时间变化 ($c = 0.5, \omega = 0.8$)

的阻尼值。随着海洋的开发，对大型深水平平台的动力分析越来越重要。由于平台高度的增加，其基频逐渐向波浪高能带区域靠拢^[11]，这对海洋结构的工程设计来说，采用耦合近似方法处理 Morison 方程可能不够安全。但由于对大型结构用完全耦合方法分析是一个非线性问题，需要用迭代法或增量一迭代法，而忽略耦合法和近似耦合法是两种线性化方法，用这种线性化方法计算量大大减少，而且可以估计响应的精确解的范围。从计算费用来说，由于在比例阻尼情况下，用忽略耦合法得到的运动方程可以解耦，对长时间的动力分析最为经济。

三种方法的差别和系统的阻尼有很大关系。图 7 给出了附加阻尼 C_{ad}^* 对波幅 H 及阻尼力系数 C_d 的比值随波角频率 ω 变化曲线，此时 $\frac{C_{ad}^*}{HC_d}$ 仅是波长 L 和水深 d 的函数，它并不

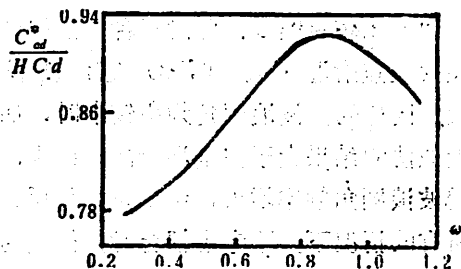
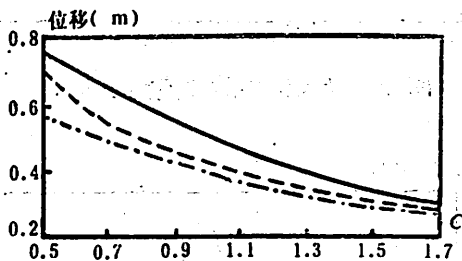


图 6 响应位移随结构阻尼系数变化 ($H = 3m, \omega = 0.8$) 图 7 附加阻尼随波浪频率变化

是单调升函数，而有峰值出现在 $\omega \approx 0.85$ 附近。由于附加阻尼的存在，不难理解当忽略耦合时响应值总是要略高于用其它两种方法得到的响应值。

4 结论

本文计算结果表明，Morison 方程中非线性耦合效应，不仅与海况有关，而且与结构阻尼系数也有关。对 Morison 方程各种处理方法的差别随着结构阻尼系数的减小而增大；在阻尼系数不变的情况下，对给定的波幅 H ，当海浪角频率接近谐振频率时，不同方法计算的结果差别亦增大。一般情况下，不考虑非线性耦合项响应值最大，计算量最小，耦合近似方法与完全耦合方法的差别随着海况的不同而改变，特别注意到结构应力的大小与结构位移

成正比, 在结构疲劳分析, 寿命估计时, 应考虑到对 Morison 方程不同处理可能引起不同的结果。本文的结论, 显然对工程应用、多自由度分析有一定的参考价值。

参 考 文 献

- [1] Lighthill, J., Waves and Hydrodynamic Loading, BOSS' 79, 1 (1979), 1-10.
- [2] Milgram, J. H., Waves and Wave Forces, BOSS' 76, 1 (1976), 11-38.
- [3] Wade, B. G., Dwyer, M., Mcdermott, J. R., On the Application of Morisons' equation to Fixed Offshore Platform, OTC 2723, Proc. Offshore Technology Conf., Houston, (1976).
- [4] Ferrante, A. S., Sphaier, S. H. et al., *Offshore Engineering*, 3 (1981), 290-300.
- [5] Clough, R. W., Penzien, J., *Dynamics of Structures*, McGraw-Hill Book Company, New York, (1975), 15-35.
- [6] Sarpkaya, T., Isaacson, M., *Mechanics of Wave Forces on Offshore Structures*, Van Nostrand Reinhold, New York, (1981) 151-228.
- [7] Hallam, M. G., Heaf, N. J., Wootton, L. R., *Dynamics of marine Structures*, London, Longmans, (1976), 213-302.
- [8] Le Mehaute, B., *An Introduction to Hydrodynamics and Water Wave*, Springer-Verlag, Dussekdorf. (1978), 149-208.
- [9] Penzien, J., Tseng, S., Three-Dimensional Dynamic Analysis of Fixed Offshore Platforms, Chapter 7 of Numerical Methods in Offshore Engineering, John Wiley & Son, NY, (1978), 221-243.
- [10] Thomson, W. T., *Theory of Vibration with Applications*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., (1972), 117-119.
- [11] Masakazu, M. et al., *Japan Shipbuilding & Marine Engineering*, 10(1978), No.2, 46-54.

On the Coupling Terms Between the Motion of Structure and Fluid in Morison Equation

Lu Yunyun Wang Xiuxi

(Department of Modern Mechanics)

Abstract

The dynamic response of the offshore structures, which is modeled to be a cantilever beam as a specific example, is presented by using Airy linear

wave theory and Morison equation. The coupling terms between the motion of structure and fluid in Morison equation are handled by three methods. The effect of these coupling terms at different conditions on dynamic response of the structure is discussed in detail. It shows that there may be much differences among these results when Morison equation is treated by the distinct methods. These results may be useful for engineering application.

Key words: offshore structures, fluid-solid interaction, dynamic response.

更 正

本刊1987年第二期,第238页中州应为卅,第288页标题应为 **An Explation**, 特此更正,并向作者、读者致歉。

114 微机自动查号系统

周 勇 王仁华 刘必成

(无线电电子学系)

摘 要

本文介绍了最近研制成功的114微机自动查号系统。该系统利用IBM-PC机可迅速查询五万门电话中任一电话的号码。系统采用单位名的汉语拼音字首代码输入方法,且以此为基础,提出了多级二次散列快速检索法。它不仅速度快,而且避免了单位名信息的存贮,从而大大节省了机器内存。检索到的电话号码通过机内的语音合成器自动报给用户。合成器采用LPC语音压缩技术,报号语音自然易懂。整个系统结构紧凑,造价便宜,便于推广。文中还讨论了该系统的进一步开发工作。

关键词: 微机查号, 多级二次散列法, LPC语音合成。

1 引言

随着我国电信事业的发展,数字程控交换设备的引进,目前中小城市拥有电话门数短期内将剧增到3~5万门。电话的普及使得邮电部门电话号码查询业务负担日益加重,加上单位电话号码变动频繁,人工查询方式已不再能胜任当前的查号业务要求。因此研制一个由计算机自动查询,并采用语音合成技术自动将电话号码报出的114查号系统迫在眉睫。

本文介绍的114微机自动查号系统是专为中小城市设计的,其主要性能特点可概括如下:

(1) 系统由IBM-PC兼容机实现,基本配置:512K字节内存,二个软盘驱动器(或者一个),单色监视器和键盘。使用汉字操作系统,具有查询五万门电话的能力。

(2) 单位名称输入采用汉语拼音字首键入的方法,该方法简便易学,击键次数少,容易掌握。重音单位用汉字显示全称后由话务员选择。

(3) 采用多级二次散列法快速检索,输入代码结束到查出号码几乎同时完成,且比普通的散列法大大地节省了内存。

(4) 建立和修改电话号码数据库的程序简便、有效,工作过程中有完整的汉字提示信息。

(5) 采用LPC语音合成技术,报号语音自然易懂,硬件装置简单,不占主机内存。

1986年6月16日收到,

(6) 报号过程脱机进行, 报号时主机可转向为新用户服务, 使系统发挥最大的查询能力。

(7) 整个查号系统结构简单, 造价较低, 宜于在中小城市推广。

下面分别介绍该系统的二个主要部分, 电话号码检索方案和语音合成报号装置。

2. 检索方案的研究

2.1 编码输入方案的选择

用计算机进行查号, 必须先告诉计算机要查询的电话单位名称。最理想的方式是让计算机去“听”用户的询问, 自动识别出要查的单位名, 然后进行检索。由于现阶段的语音识别技术还不成熟, 这种方案近期内很难实用。因此, 本系统采用了键盘输入方式, 即操作员在听到用户询问的单位名后便从计算机的键盘上输入能表示该单位名的一串代码字符。显然, 这串代码字符的平均长度越短, 输入的效率越高。考虑到单位名称是操作员从耳机里听到的, 首先获得的关于单位名的信息是音而不和形, 我们决定采用单位名称中每个汉字的汉语拼音的第一个字母组成的字符串作为该单位的代码(以下简称拼音字首代码), 如科(Ke)大(Da)的代码为KD。

2.2 几种常用的检索方法

要解决的电话号码检索主要涉及到两个方面的问题——造表与查表。也就是将电话单位名称信息和电话号码信息存放在一个具有一定结构的表中, 查表时按给定的单位名称确定该单位的电话号码在表中的位置, 然后取出电话号码。我们希望检索速度(尤其是表查速度)要快, 检索表占的存贮空间要小, 一般来说, 这两者是矛盾的。如何设计一种造表及查表的方法能尽可能好地解决以上矛盾, 便是检索方案研究的核心。

2.2.1 顺序比较法

这是一种最简单的造、查表方法。它将电话单位的名字按任意顺序依次存入表区, 相应地也存入它们的电话号码。查表时将给定的单位名称与表区中的单位名称逐个比较, 根据它在表中的地址找出对应的电话号码。该方法程序实现简单, 但查表速度很慢。假定表长即单位个数为 L , 则平均每查询一次需要比较 $n \approx \frac{L}{2}$ 次。如 $L = 50000$, 则 $n = 25000$, 可见工作量相当可观。顺序比较法的另一缺点是它必须存放单位名称信息。假定我们至少要用6个字节来表示五万个电话单位的一个名字, 五位电话号码用17比特来表示, 由于单位名称和电话号码在表区中是顺序填满每一个单元的, 它的内存利用率为

$$\eta = \frac{\text{有用信息所占的内存量}}{\text{表所占的总内存量}} = \frac{L \times 17}{L(48 + 17)} \approx 26.1\%$$

五万门电话的检索表需占用406Kb的内存空间! 这对一台支持汉字系统, 内存只有215Kb的PC机来说是难以接受的。

2.2.2 排序——二分法

这个方法中的名字信息的存贮顺序不是任意的, 而是按名字信息的某种码值(如按单位名称拼音字首代码串在计算机内的数字表示值)的大小来排列。假定要查的单位名的对应值为 M , 二分法查表就是取表的中点单元的值 $M_{\frac{1}{2}}$ 和 M 进行比较, 如 $M = M_{\frac{1}{2}}$ 则表示查到, 取出中

对应的电话号码，否则根据 $M < M_{\frac{1}{2}}$ 或 $M > M_{\frac{1}{2}}$ 决定是取表的上半部分（码值较小的区域）或下半部分（码值较大的区域）的中点再进行以上比较，依此类推。这种方法比顺序法查表速度更快，它查询一个电话需要的比较次数最多为

$$n_{\max} = \log_2 L$$

若 $L = 50000$, $n_{\max} \approx 16$ 。该方法的内存利用率与顺序法相同。造表时必须先将名字按码值大小进行排序，所以表的修改比较麻烦。

2.2.3 散列(Hash)法^[1-4]

散列法是一种快速的造、查表方法。它定义一个函数 $H(M)$ ，自变量 M 为名字码值，对每一个名字 M ，函数值 $H(M)$ 是某一确定长的表区中某一单元的地址。如果某单位 M 唯一地与地址 $H(M)$ 对应，则对应的电话号码就可存放在该地址上。因此各个单位的电话号码在表区中不是按顺序存放的，而是按名——址转换函数 H 的规律散列在表区中。可能有很多单位根本不和任何单位名对应，而被闲置着，造成填充率 ρ （填入信息的单元数占总单元数的比率）的降低。函数 H 又称散列函数。一般来说， H 具有多一对应性，即

$$H(M_i) = H(M_j) \quad i \neq j$$

这种情况又称为冲突。一个好的散列函数应满足计算速度快，冲突可能性小（即尽可能均匀地散列整个表区）的要求。普通的散列法必须存放单位名信息（甚至还要存链地址），它是通过扩大表区占有的空间（减小填充率）和牺牲速度（多次比较）来解决冲突的^[2,4]。这使得实际内存利用率大大降低，其利用率为

$$\eta = \frac{17}{48+17} \times \rho = 0.2619\rho$$

若取 $\rho = 70\%$ ，则 $\eta = 18.3\%$ 。用这样的散列法查询五万门电话号码需要内存容量为 580Kb；这对我们的系统来说也是无法接受的。

2.3 多级二次散列法

为了解决冲突又避免单位名信息的存贮，我们提出了一种有效的多级二次散列检索方案。该方法分级造表，每级上有表 A 和 B。表 B 每单元 17 比特，用来存电话号码，共有 L_B 单元。表 A 每单元 1 比特，用来指示冲突发生与否，共有 L_A 单元。 $L_A > L_B$ ，如图 1 所示。造表过程是这样的：表 A 的单元初始时全为 0，单元名先经散列函数 H_A 运算，对应到表 A 的一个地址。若表 A 的某个单元只与一个单位名对应，则将它置成 1（如图 1 中 M_1, M_2, M_4 对应的单元）；和两个或更多个单位名对应或不对任何单位名的单元保持为 0（如图 1 中的 M_3, M_5 对应的单元）。然后对那些唯一地对应表 A 的某地址单位名 (M_1, M_2, M_4) 再进行第二次散列运算 H_B ，得到它在表 B 中的对应地址。由于 $L_A > L_B$ ， H_B 仍会再次引起冲突。如果不再冲突，即单位名在表 A 和表 B 中都有唯一的对应对址（如 M_2 ），则将对应的电话号码 (N_2) 存入表 B 的对应单元。如有两个（或多个）单位名在表中有唯一地址而在 B 表中冲突（如 M_1, M_4 ），则可将其中一个单位的电话（如 N_1 ）存入表 B 对应单元，同时将表 A 中与冲突中另一个（些）单位名（如 M_4 ）对应的单元由 1 变为 0，表示冲突在表 B 中发生，

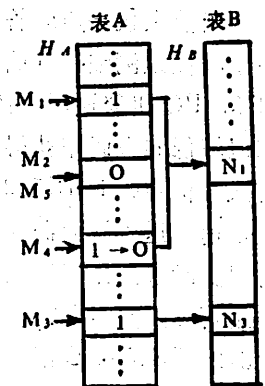


图 1 多级二次散列法

其电话号码无法存入本级表。对所有电话未存入本级的单位再用上述方法构造下一级 A—B 表，依此类推。查表时，先用 H_1 对给定的单位名 M 进行运算，以 $H_1(M)$ 为地址查询表 A 对应单元，如内容为 1，说明它的电话已存入本级表 B 中，可再用 H_2 对 M 进行二次散列运算，以所得地址从表 B 中读出电话号码。如果对应的表 A 内容为 0，表示它在本级表 A 或表 B 中发生了冲突，再到下一级表中按同样方法查询。

这种多级二次散列法以 1 比特辅助表 A 代替了单位名信息和键地址的存贮，免去了单位名字符串的比较，大大地缩小了附加空间。而且由于表 A 的作用，使得表 B 的填充率大大提高，从而进一步提高了内存利用率。实验结果表明，这种多级二次散列法的内存利用率可达 60%。这样五万门电话的检索表仅需要约 195Kb 的内存。和普通散列法一样，该方法检索速度快，无须排序，修改方便。此外，逐级的 A—B 表检索可和输入各字符代码次序相对应，故它特别适合于边输入代码边检索的方式。本系统的研制中，最大列表级数为 11。对那些由于冲突最终未能存入表中的极少数单位，可将其汉字单位名列出，由操作员确定电话号码。采用逐级检索方式和快速散列算法后，现有的系统要查一个单位（除下属小单位外）的电话号码，平均击键次数为 3~4 次。最后值得指出的这种多级方式还便于灵活地存放检索表，如将后面部分级上的表存入磁盘（这不会太影响平均检索速度）或扩充内存，该系统可很容易地扩展为检索十万门或更多电话的系统。

3 语音合成报号部分

3.1 LPC 语音合成技术

当系统查询到所需单位的电话号码后，即启动一个语音合成装置自动将该号码报出去。由于报号语音直接传给询问的用户，因此报号的正确与否，语音音质的清晰和自然是至关重要的。对语音合成装置的首先要求是合成语音的音质要自然、易懂；其次，一般来说计算机处理信息的速度远远大于声音系统的工作速度，因此设计语音合成器时应考虑到语音合成和报出电话号码过程均应与主机脱离开而独立完成；第三、硬件结构尽量简单，降低成本。

当前微机语音应答系统毫无例外地都采用数字语音合成的方式。根据上述要求，我们采用了线性预测编码（简称 LPC）技术，并以 TMS5220 单片语音处理器为核心，设计成 IBM-PC 机能通用的语音合成报号装置。LPC 语音合成是目前较为令人瞩目的一种技术，它以较低的数码率获得相对高的语音质量，具有灵活、通用性强、硬件复杂程度中等、宜于合成等优点。TMS5220 则是根据 LPC 合成原理设计出来的单片语音合成处理器，只要按规定速率送入滤波器的参数 $K_1 \sim K_{10}$ ，激励源参数音调周期 P 增益常数 G 等，TMS5220 就可以实时合成出音质相当好的语音来。有关 LPC 语音合成的基本原理和 TMS5220 的开发应用可参阅文献 [5]、[6]。

3.2 IBM-PC 语音板

图 2 是语音合成板的逻辑框图。该板设计成 IBM-PC 通用的插件结构，它由语音合成输出电路以及和 IBM-PC 机的接口电路组成。为了保证语音板能脱机工作，语音合成板是由独立的 Z-80A CPU 进行控制，在接口电路部分设置了二个暂存缓冲器，用来作为主机与语音合成部分的“联络站”。当 PC 机系统检索到要报出的单位电话号码后，先检测语音板接口电路中状态口的状态，确定是否允许号码数据的传输。如测定到声道处于空闲状态，

则将电话号码输入到号码口暂存，同时向 Z-80A CPU发中断请求，Z-80A CPU 响应中断后，将号码取出存放到内存指定的单元中，这时 PC 机就可以转向新的用户服务，准备查询另一个单位的号码。语音合成和报号过程则由 Z-80A CPU 去控制 TMS5220 完成，合成语音所需的 LPC 数据是预先在计算机上分析和编码后存入数据 ROM 的。

TMS5220 要求按每秒 40 帧，每帧 50 比特的速率工作，故最高数码率是 2400 比特/秒（实际上利用语音信号帧与帧之间的相关性，平均数码率可低至 1200 比特/秒），这样存贮一秒钟的语音只需要 2400 比特内存。目前该装置已存有 0~9 十个数字以及 5, 9 的变音，还有么、拐、两、洞、您好、没有电话等，仅占 1722 个字节，加上管理程序在内可全部固化在

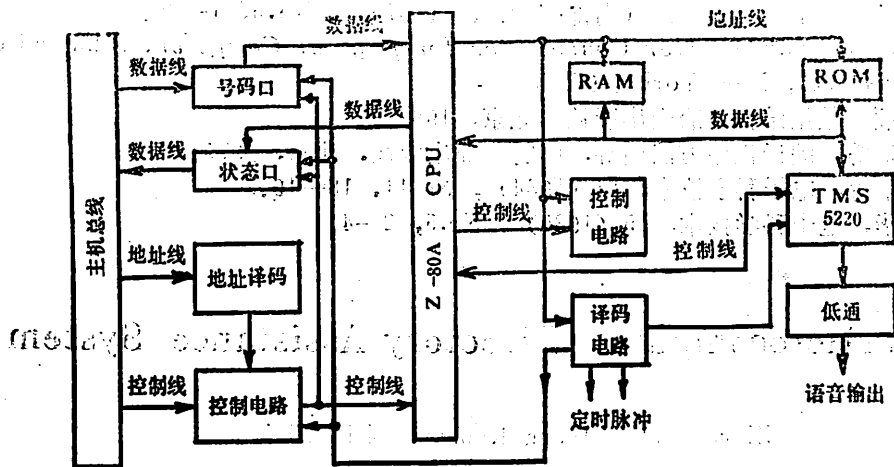


图 2 语音板的逻辑框图

语音板上的一片 2716 EPROM 中。因此整个板结构紧凑，制作和维修均十分方便。

4 结语

本文介绍的 114 微机自动查号系统已于 1985 年底研制成功并在市话系统投入试用，用户初步反映良好，认为该系统基本满足邮电部门查号业务的要求，查号过程迅速正确，报号语音清晰自然，话务员较少记忆和讲话，劳动强度大大减轻。有关部门的专家鉴定后也认为该系统技术水平先进，经济效益与社会效益显著，建议在中小城市推广应用。

该系统还具有进一步的开发潜力，其中主要的有：

(1) 增加主机内存或将部分数据存入磁盘，原则上可以使系统查询能力扩大到十万门电话以上。并可根据需要，引入检错技术，进一步提高系统检测操作员键入错误的能力。

(2) 可在本系统基础上发展多终端，多声道。由于查号过程中，大量的时间是花在操作员和用户的对话，单位代码的键入，电话号码的报出等方面，因此可采用多终端的操作，使一台主机同时为多个用户服务，对充分利用 PC 机的查询能力，共享信息资源，降低成本等均有重要意义。多声道的问题在语音板的设计方案中已给予了考虑，事实上只要在语音板上增加几片 TMS5220 就可以形成多声道输出的能力。

(3) 发展语音识别技术，使单位名的输入方式改为键盘输入和自动识别用户呼叫共同

完成,可进一步提高工作效率。

本文介绍的114微机自动查号系统的研究成果很容易推广到其它类似的计算机查询检索业务,并且它所涉及的语音合成和语音识别技术的研究也将对人机语声通信的发展起到推动作用。

参加过这项研究工作的还有80级学生邵敏,阎晓红,吴家明,王明杰等。

参 考 文 献

- [1] 王廷俊,电子计算机动态(内部刊物), (1975), No.5, 1—20.
- [2] David Gries, *Compiler Construction for Digital Computer*, John Wiley & Sons Inc., New York, (1971).
- [3] 姚天顺,数据结构,冶金出版社,北京,1981.
- [4] 何新贵等,编译程序方法引导,国防工业出版社,北京,1979.
- [5] 王仁华等,电子科学技术,14 (1984), No.11, 18—19.
- [6] 王仁华,电子科学技术,15 (1985), No.5, 2—4.

A 114 Microcomputer Directory Assistance System

Zhou Yong Wang Renhua Liu Bicheng

(Department of Radio Electronics)

Abstract

A recently developed 114 microcomputer directory assistance system is introduced in this paper. Any of 50000 phone numbers can be quickly inquired of the system based on an IBM-PC. In this system, the initial letter string of the phone-unit name is used as input code. A multistage double hash searching algorithm is designed, with this algorithm, there is no need to store the information about the unit name, hence the computer memory space required is much reduced besides the high searching speed. The phone number found is automatically reported to phone user through a speech synthesizer in the computer. The LPC speech compression scheme is adopted in the synthesizer, and the reporting voice is natural and understandable. As the whole system is compact, and inexpensive, it can be easily popularized.

Key words: microcomputer retrieve, multistage double hash algorithm, LPC speech synthesis.

特征轨迹—交互控制器设计方法

庞国仲 濮洪钧

(系统科学和管理科学系)

摘 要

特征轨迹法是多变量反馈系统一种主要设计方法，已成功用于控制系统设计。但是，这种方法有很大的缺点，即不能由对象传递函数矩阵 $G(s)$ 的特征传递函数和特征方向的特点设计控制器 $K(s)$ 。因此，系统设计过分依赖设计者的经验。为了解决这个问题，提出了一种新的设计方法，即特征轨迹—交互控制器设计方法。我们不仅提出了设计系统的步骤，而且编写了计算机辅助设计程序，对一些工业对象进行系统设计，取得了令人满意的结果。

关键词：特征传递函数，特征轨迹，整体性，失调角，调准。

交互控制器^[1]

多变量反馈系统如图1所示。

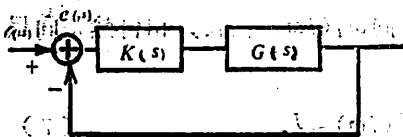


图1 单位反馈系统

其中， $r(s)$ 为 m 维输入向量； $y(s)$ 为 m 维输出向量； $e(s)$ 为 m 维误差向量； $G(s)$ 为正则、可逆的 $m \times m$ 对象传递函数矩阵，它的元素为 s 的有理函数； $K(s)$ 为正则，可逆的 $m \times m$ 控制器传递函数矩阵。

对 $G(s)$ 实行相似变换，可以求出特征传递函数 $g_i(s) (1 \leq i \leq m)$ ，和相应的特征方向 $m_i(s) (1 \leq i \leq m)$ ，并且构成特征方向矩阵

$$M(s) = [m_1(s) m_2(s) \cdots m_m(s)]$$

其逆为

$$N(s) = M^{-1}(s)$$

于是

$$G(s) = M(s) \text{diag}\{g_i(s)\}_{1 \leq i \leq m} N(s) \quad (1)$$

设计控制器

$$K(s) = M(s) \text{diag}\{k_i(s)\}_{1 \leq i \leq m} N(s) \quad (2)$$

1986年9月1日收到。

则系统开环传递函数为

$$Q(s) = G(s)K(s) = M(s) \text{diag}\{g_i(s)k_i(s)\}_{1 \leq i \leq m} N(s) = K(s) \hat{G}(s) \quad (3)$$

故把这种设计方法称为交互控制器法。

在一般情况下，由于特征方向 $m_i(s)$ ($1 \leq i \leq m$) 不是 s 的有理函数，故 $K(s)$ 在工程上不能实现。因此，这种方法不能做为一种独立设计方法。

2 特征轨迹设计方法^[2]

已知对象传递函数矩阵 $G(s)$ ，设计控制器 $K(s)$ ，于是系统开环传递函数矩阵为

$$Q(s) = G(s)K(s)$$

对 $Q(s)$ 进行相似变换，求得特征传递函数 $q_i(s)$ ($1 \leq i \leq m$) 和相应特征方向 $w_i(s)$ ($1 \leq i \leq m$)，并且构成特征方向矩阵。

$$W(s) = [w_1(s) w_2(s) \cdots w_m(s)]$$

其逆为

$$V(s) = W^{-1}(s)$$

则系统开环传递函数矩阵为

$$Q(s) = W(s) \text{diag}\{q_i(s)\}_{1 \leq i \leq m} V(s) \quad (4)$$

回差矩阵为

$$D(s) = I_m + Q(s) = W(s) \text{diag}\{1 + q_i(s)\}_{1 \leq i \leq m} V(s) \quad (5)$$

闭环传递函数矩阵为

$$H(s) = [I_m + Q(s)]^{-1} Q(s) = W(s) \text{diag}\left\{\frac{q_i(s)}{1 + q_i(s)}\right\}_{1 \leq i \leq m} V(s) \quad (6)$$

特征轨迹 当 s 沿奈氏围线 D (如图 2 所示) 变化一周时，特征传递函数 $q_i(s)$ ($1 \leq i \leq m$) 在 s 平面上绘出封闭曲线 Γ_i ($1 \leq i \leq m$)，称 Γ_i ($1 \leq i \leq m$) 为 $Q(s)$ 的特征轨迹。

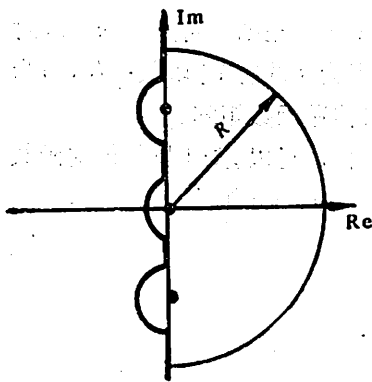


图 2 奈氏围线 D

失调角 如果特征方向 $w_i(j\omega)$ ($1 \leq i \leq m$) 和自然基向量 e_i ($1 \leq i \leq m$) 调准，即

$$W(j\omega) \approx I_m, V(j\omega) \approx I_m \quad (7)$$

于是

$$H(j\omega) \approx \text{diag}\left\{\frac{q_i(j\omega)}{1 + q_i(j\omega)}\right\}_{1 \leq i \leq m} \quad (8)$$

表明系统的关联已变得足够小。但在一般情况下，不能把 $w_i(j\omega)$ ($1 \leq i \leq m$) 和 e_i ($1 \leq i \leq m$) 完全调准，两者之间有一个夹角，称为失调角，把它作为衡量系统关联的尺度。

定义为

$$\theta_i(j\omega) = \cos^{-1} \frac{|(w_i(j\omega), e_i)|}{\|w_i(j\omega)\|} \quad (1 \leq i \leq m) \quad (9)$$

其中

其中

$$(w_i(j\omega), e_i) = \sum_{i=1}^m \frac{w_i(j\omega)}{e_i}$$

$$\|w_i(j\omega)\| = \sqrt{w_i^+(j\omega)w_i(j\omega)}$$

下面讨论多变量系统性能指标和特征传递函数、特征方向的关系。

(i) 稳定性^[1] 多变量反馈系统有如下重要关系式, 即

$$\frac{\phi_c(s)}{\phi_o(s)} = \det D(s) \quad (10)$$

其中, $\phi_c(s)$ 为系统闭环特征多项式;

$\phi_o(s)$ 为系统开环特征多项式。

将式 (5) 代入式 (10), 得

$$\frac{\phi_c(s)}{\phi_o(s)} = \prod_{i=1}^m [1 + q_i(s)] \quad (11)$$

根据幅角原理, 由上式可得

$$n_c - n_o = \sum_{i=1}^m n_i \quad (12)$$

式中, n_c 为系统闭环特征多项式在 s 右半闭平面上的零点数;

n_o 为系统开环特征多项式在 s 右半闭平面上的零点数;

n_i ($1 \leq i \leq m$) 为特征轨迹 Γ_i ($1 \leq i \leq m$) 包围临界点 $(-1, j_0)$ 的次数。

由此得到稳定性定理 1。

定理 1 由图 1 描述的多变量反馈系统为渐近稳定的充分必要条件是

$$n_o + \sum_{i=1}^m n_i = 0 \quad (13)$$

(ii) 关联性^[2] 已知

$$H(j\omega) = W(j\omega) \text{diag} \left\{ \frac{q_i(j\omega)}{1 + q_i(j\omega)} \right\}_{1 \leq i \leq m} V(j\omega)$$

如果在低频 $0 \leq \omega \leq \omega_l$ 范围内, 使 $|q_i(j\omega)| \gg 1$ ($1 \leq i \leq m$), 则

$$H(j\omega) \rightarrow W(j\omega)V(j\omega) = I_n \quad (14)$$

显然高增益减弱了系统的低频关联。

如果在中、高频范围内的失调角 $\theta_i(j\omega)$ ($1 \leq i \leq m$) 足够小, 那么, 系统的中、高频关联将很弱。

此外, 还要求系统有良好的整体性^[3]、瞬态和稳态特性。

由于对象 $G(s)$ 的特征传递函数和特征方向同 $G(s)K(s)$ 的特征传递函数和特征方向之间没有明显的关系, 因此, 虽然知道 $G(s)$ 的特征轨迹和特征方向的信息, 但不能用于指导控制器的设计。这样控制器的选择主要依靠设计者的经验, 使系统设计带有很大的盲目性, 这是特征轨迹法的弱点。这就迫使人们另辟捷径, 终于找到了较好的解决方法, 即把特征轨迹法和交互控制器结合起来, 形成了特征轨迹—交互控制器设计方法, 使特征轨迹法更臻于

完善和有效。

3 特征轨迹—交互控制器设计方法

该方法是以特征轨迹法为基础，吸收了交互控制器的优点而形成。它用交互控制器方法设计控制器，从而克服了特征轨迹依靠经验选取控制器的缺点，使特征轨迹法成为一种完整而有效的设计方法。

假设已给出 $G(s)$ 的特征轨迹 $\Gamma_i (1 \leq i \leq n)$ ，但不满足设计要求，需要对特征轨迹 $\Gamma_i (1 \leq i \leq n)$ 进行补偿。根据 $\Gamma_i (1 \leq i \leq n)$ 的特点，选取有代表性的频率点 ω_1 ，求出 $G(j\omega_1)$ 的特征值和特征向量，于是有

$$G(j\omega_1) = W(j\omega_1) \text{diag}\{g_i(j\omega_1)\}_{1 \leq i \leq n} V(j\omega_1) \quad (15)$$

取控制器

$$K(s) = W(j\omega_1) \text{diag}\{k_i(s)\}_{1 \leq i \leq n} V(j\omega_1) \quad (16)$$

其中 $k_i(s) (1 \leq i \leq n)$ 为标量传递函数。在频率点 ω_1 系统开环传递函数矩阵为

$$\begin{aligned} Q(j\omega_1) &= G(j\omega_1)K(j\omega_1) \\ &= W(j\omega_1) \text{diag}\{g_i(j\omega_1)k_i(j\omega_1)\}_{1 \leq i \leq n} V(j\omega_1) \end{aligned} \quad (17)$$

只要补偿网络 $k_i(s) (1 \leq i \leq n)$ 选得合适，可以把 $g_i(j\omega_1) (1 \leq i \leq n)$ 配置到希望的位置上。根据连续性原理，在频率 ω_1 点的邻域内， $g_i(j\omega) (1 \leq i \leq n)$ 也将得到较为满意的补偿。但是，在一般情况下，矩阵 $W(j\omega_1)$ 和 $V(j\omega_1)$ 为复常阵，故控制器 $K(s)$ 无法实现。为此，取控制器

$$K(s) = A \text{diag}\{k_i(s)\}_{1 \leq i \leq n} B \quad (18)$$

称 $K(s)$ 为近似交互控制器，其中矩阵 A 和 B 分别为 $W(j\omega_1)$ 和 $V(j\omega_1)$ 的近似实阵。后面将讨论如何求矩阵 $W(j\omega_1)$ 和 $V(j\omega_1)$ 的近似实阵。

要指出的是，在一般情况下，只在一个频率点 ω_1 ，对 $G(s)$ 的特征轨迹 $\Gamma_i (1 \leq i \leq n)$ 进行补偿，往往不能使系统各项指标都满足设计要求。因而根据 $G(s)$ 的特征轨迹和特征方向失调角曲线，把系统工作频率范围分成高频、中频和低频三个频段（一般分为高频段和中—低频段）。在每个频段各选取一个有代表性的频率点，对 $G(s)$ 的特征轨迹进行补偿，使系统各项指标都满足设计要求。

英国学者麦克法兰等人提出了求特征向量 $w_i(j\omega_1) (1 \leq i \leq n)$ 和逆向量 $v_i^T(j\omega_1) (1 \leq i \leq n)$ 近似实向量 $a_i (1 \leq i \leq n)$ 和 $b_i^T (1 \leq i \leq n)$ 的方法，称为 ALIGN 方法。下面简单介绍这种方法。

选取一实向量 a_i 和向量 $w_i(j\omega_1)$ 调准。定义商式为

$$\phi_i = \frac{|(v_i, a_i)|^2}{\sum_{i=1}^m |(v_i, a_i)|^2} \quad (19)$$

其中

$$v_i = \alpha_i + j\beta_i, \quad v_j = \alpha_j + j\beta_j$$

于是

$$\phi_i = \frac{a_i^T C_i a_i}{a_i^T D_i a_i} \quad (20)$$

式中

$$C_i = \alpha_i \alpha_i^T + \beta_i \beta_i^T, \quad D_i = \sum_{j=1}^m (\alpha_j \alpha_j^T + \beta_j \beta_j^T)$$

显然, C_i, D_i 是非负的、实对称矩阵。

$$\text{为求 } \phi_i \text{ 对 } a_i \text{ 的极大值, 取 } \frac{d}{da_i}(\phi_i) = 0 \quad (21)$$

得

$$C_i a_i = D_i a_i \phi_i \quad (22)$$

如果 λ_i 是 ϕ_i 的极大值, 上式可写为

$$C_i a_i = \lambda_i D_i a_i \quad (23)$$

假设 D_i 是正定的, 它可以分解为 $D_i = R_i A_i^2 R_i^T$, 其中 R_i 是正交矩阵, 它的列是 D_i 的特征向量; A_i^2 是正的实特征值的对角阵。对于方程(23), 有

$$\det[(C_i - \lambda_i D_i)] = 0$$

将 D_i 代入上式, 得到

$$\begin{aligned} \det[C_i - \lambda_i D_i] &= \det\{R_i A_i [A_i^{-1} R_i^T C_i R_i A_i^{-1} - \lambda_i I]\} A_i R_i^T \\ &= \det[A_i^2] \det[S_i - \lambda_i I] = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

其中, $S_i = A_i^{-1} R_i^T C_i R_i A_i^{-1}$ 。因为 D_i 是非奇异的, 即

$$\det[A_i^2] \neq 0$$

故有

$$\det[S_i - \lambda_i I] = 0 \quad (25)$$

这样可求出 S_i 的特征值和相应的特征向量。而矩阵 S_i 是实对称阵, 它的特征值是实数。 S_i 的最大特征值给出 ϕ_i 的最大值。设 Z_i 是矩阵 S_i 相应于最大特征值 λ_i 的特征向量, 故有

$$S_i Z_i = \lambda_i Z_i \quad (26)$$

将 S_i 代入, 得

$$C_i R_i A_i^{-1} Z_i = \lambda_i D_i R_i A_i^{-1} Z_i \quad (27)$$

比较式(23)和(27), 得

$$a_i = R_i A_i^{-1} Z_i \quad (28)$$

a_i 就是所求的实向量, 并把它规范化。令 $i=1, 2, \dots, m$, 按上述过程重复 m 次, 依次求得 $a_i (1 \leq i \leq m)$, 并构成矩阵

$$A = [a_1 a_2 \dots a_m] \quad (29)$$

它是 $W(j\omega_1)$ 的近似实阵。求矩阵

$$B = A^{-1} \quad (30)$$

它是 $V(j\omega_1)$ 的近似实阵。

ALIGN方法在特征轨迹法中如同“准对角化方法”, 在奈氏阵列法中同样重要。使特征轨迹法摆脱了过分依赖试凑的窘境, 成为一种完整而有效的设计方法。我们根据特征轨迹法的原理, 提出系统设计的步骤。

(I) 确定系统开环特征多项式位于 s 右半闭平面上的极点数 n_p 。

(II) 绘制回比矩阵 $T_i(s)$ 的特征轨迹 $\Gamma_i (1 \leq i \leq m)$ 和特征方向的失调角曲线 $\theta_i(\omega) (1 \leq i \leq m)$ 。

(III)由失调角曲线估算系统高频关联是否符合设计要求,如不满足,设计控制器 K_h . 选取高频点 ω_h , 计算 $G^{-1}(j\omega_h)$. 用 ALIGN方法求出 $G^{-1}(j\omega_h)$ 的近似实阵 A_h , 使 $G(j\omega)A_h \approx I_n$.

取控制器

$$K_h = A_h \quad (31)$$

返回步骤 II, 检验系统高频关联是否满足要求.

(IV)判断闭环系统稳定性. 如系统不稳定或稳定裕量不够, 设计控制器 $K_m(s)$, 对系统特征轨迹的中频段进行补偿. 选取频率点 ω_m , 计算 $G(j\omega_m)K_h$, 并求出特征值和特征向量, 于是

$$G(j\omega_m)K_h = W(j\omega_m)\text{diag}\{g_i(j\omega_m)\}_{1 \leq i \leq n}V(j\omega_m) \quad (32)$$

用 ALIGN方法求出 $W(j\omega_m)$ 和 $V(j\omega_m)$ 的近似实阵 A_m 和 B_m . 取控制器为

$$K_m(s) = A_m \text{diag}\{k_i(s)\}_{1 \leq i \leq n} B_m \quad (33)$$

在频率点 ω_m , 系统开环传递函数矩阵为

$$\begin{aligned} Q(j\omega_m) &= G(j\omega_m)K(j\omega_m) \\ &\approx A_m \text{diag}\{g_i(j\omega_m)k_i(j\omega_m)\}_{1 \leq i \leq n} B_m \end{aligned} \quad (34)$$

选取补偿网络 $k_i(s)$ ($1 \leq i \leq n$), 直接补偿 $G(s)K_h$ 的特征轨迹, 以满足系统设计要求. 并返回步骤 II 检验系统是否稳定, 稳定裕量和关联是否符合设计要求. 如不满足, 重新设计控制器 $K_m(s)$.

(V)根据系统特征轨迹估计低频关联和稳态精度是否符合设计要求. 如不满足, 设计低频控制器. 选取频率点 ω_l , 求出向量矩阵 $W(j\omega_l)$ 和 $V(j\omega_l)$, 并求出近似实阵 A_l 和 B_l .

取 $K_l = A_l \text{diag}\{k_i\}_{1 \leq i \leq n} B_l$ (35)

控制器为

$$K_l(s) = \frac{\alpha}{s} K_l + I_n \quad (36)$$

其中 α 为正实数. 总控制器为

$$K(s) = K_h K_m(s) K_l(s) \quad (37)$$

绘制 $G(s)K(s)$ 的特征轨迹和特征方向失调角曲线, 判断闭环系统的稳定性, 并估计系统的关联性瞬态特性和稳态特性是否符合设计要求.

(VI)绘制回比矩阵 $T_r(s)$ 、 $T_s(s)$ 的所有主子矩阵的特征轨迹 ($T_r(s)$ 和 $T_s(s)$ 的定义参阅文献 3), 检验系统的整体性是否符合要求. 如不满足, 返回步骤 II, 重新设计控制器 $K(s)$.

(VII)作闭环系统的单位阶跃响应, 检验系统的关联性、瞬态特性和稳态性能是否符合设计要求. 并调整增益 k , 使系统的各项指标得到合理分配. 如某些指标不满足要求, 返回步骤 II, 重新设计控制器 $K(s)$.

(VIII)计算总控制器

$$K(s) = k K_h K_m(s) K_l(s) \quad (38)$$

根据系统步骤, 我们设计了计算机辅助设计的流程图, 如图 3 所示, 并用 FORTRAN 语言编写了程序.

4 设计实例

某工厂的化学反应器，其传递函数矩阵为

$$G(s) = \frac{1}{\phi_0(s)} \begin{pmatrix} g_{11}(s) & g_{12}(s) \\ g_{21}(s) & g_{22}(s) \end{pmatrix}$$

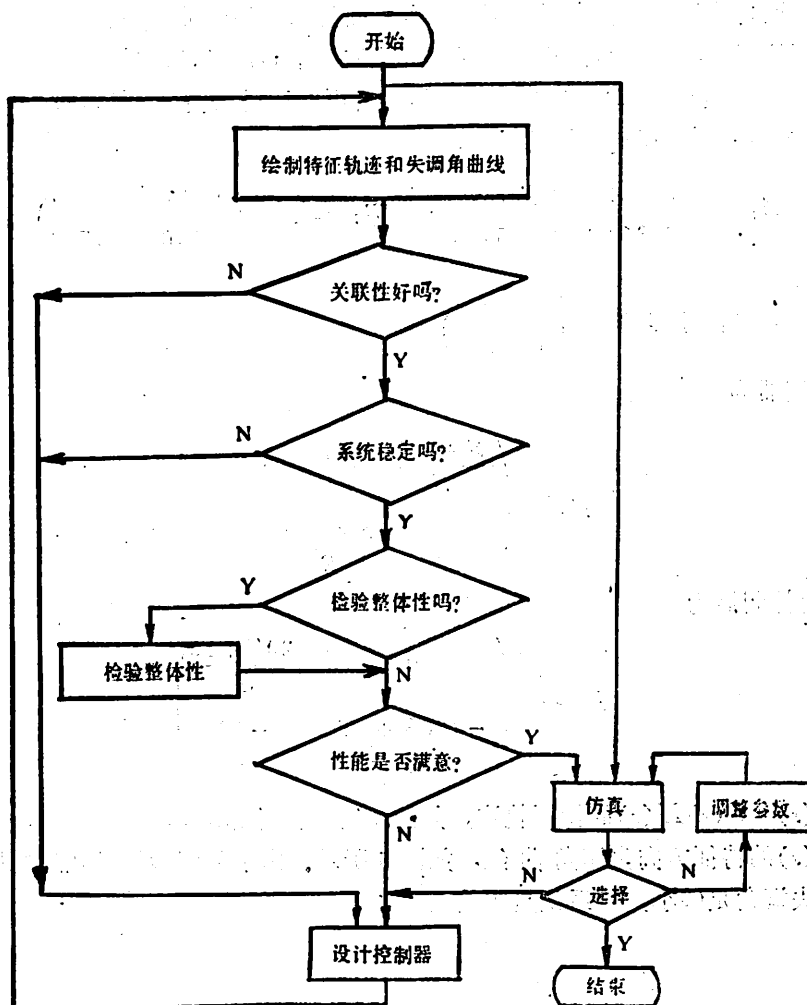


图 3 特征轨迹—交互控制器设计方法框图

其中，

$$g_{11}(s) = 29.2S + 263.3$$

$$g_{12}(s) = -(3.146S^3 + 32.62S^2 + 89.93S + 31.81)$$

$$g_{21}(s) = 5.679S^3 + 42.67S^2 - 68.93S - 106.8$$

$$g_{22}(s) = 9.43S + 15.15$$

$$\begin{aligned} \phi_0(s) &= S^4 + 11.67S^3 + 15.75S^2 - 88.31S + 5.514 \\ &= (S - 0.063)(S - 1.99)(S + 5.057)(S + 8.67) \end{aligned}$$

试设计控制器 $K(s)$ ，构成单位反馈系统，使系统不仅稳定，而且满足如下性能指标。

调整时间 $T_s < 0.5$ 秒, 最大过调量小于 10%, 关联小于 5%, 对阶跃信号的稳态误差为零。

解 该系统是不稳定和强关联的。首先设计高频控制器 K_h 。选取高频率点 $\omega_h = 30 \text{rs}^{-1}$, 求出 $G^{-1}(j\omega_h)$ 的近似实阵 $A_h = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 。取控制器为 $K_h = A_h$ 。由 $Q_1(s) = G(s)K_h$ 的特征轨迹和失调角曲线可以看出系统不仅稳定, 而且高频为弱关联的。

设计低频控制器, 根据 $Q_1(s)$ 的特征轨迹选取频率 $\omega_l = 1.1 \text{rs}^{-1}$, 计算

$$Q_1(j1.12) = W(j1.12) \text{diag}\{q_i(j1.12)\}_{i=1,2} V(j1.12)$$

求出 $W(j1.12)$ 和 $V(j1.12)$ 的近似实阵

$$A_l = \begin{pmatrix} 0.584 & 0.997 \\ -0.812 & -0.0754 \end{pmatrix}, \quad B_l = A_l^{-1} = \begin{pmatrix} 0.097 & -1.284 \\ 1.046 & 0.753 \end{pmatrix}$$

选取 $k_1 = 1, k_2 = 2$, 于是 $K_l = \begin{pmatrix} 2.1 & 0.8 \\ 0 & 0.9 \end{pmatrix}$

取 $\alpha = 1$, 控制器为

$$K_l(s) = \begin{pmatrix} \frac{S+2.1}{S} & \frac{0.8}{S} \\ 0 & \frac{S+0.9}{S} \end{pmatrix}$$

取 $k = 20$, 总控制器为

$$K(s) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{20S+16}{S} \\ \frac{-(20S+42)}{S} & \frac{-18}{S} \end{pmatrix}$$

绘制 $Q(s) = G(s)K(s)$ 的特征轨迹, 如图 4 所示。计算出 $n_1 + n_2 = -2$, 故闭环系统稳定。绘制 $Q(s)$ 的特征方向失调角曲线, 如图 5 所示。由于低频时特征轨迹的模足够大, 而中一高频的失调角足够小, 故系统是弱关联的。

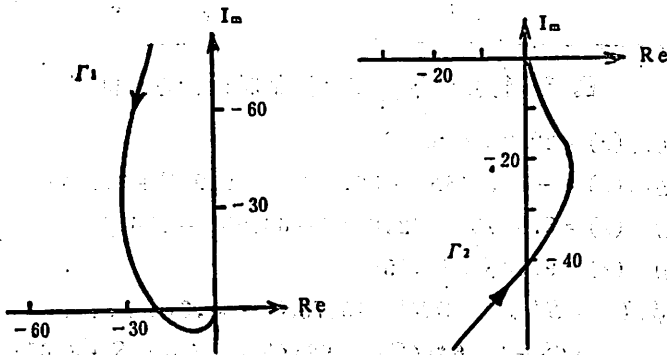


图 4 $Q(s)$ 的特征轨迹

作闭环系统的单位阶跃响应，如图 6 所示。可见，系统各项指标都满足设计要求。

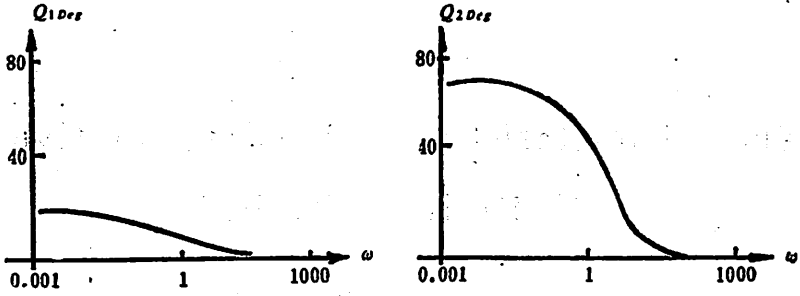


图 5 $Q(s)$ 的失调角曲线

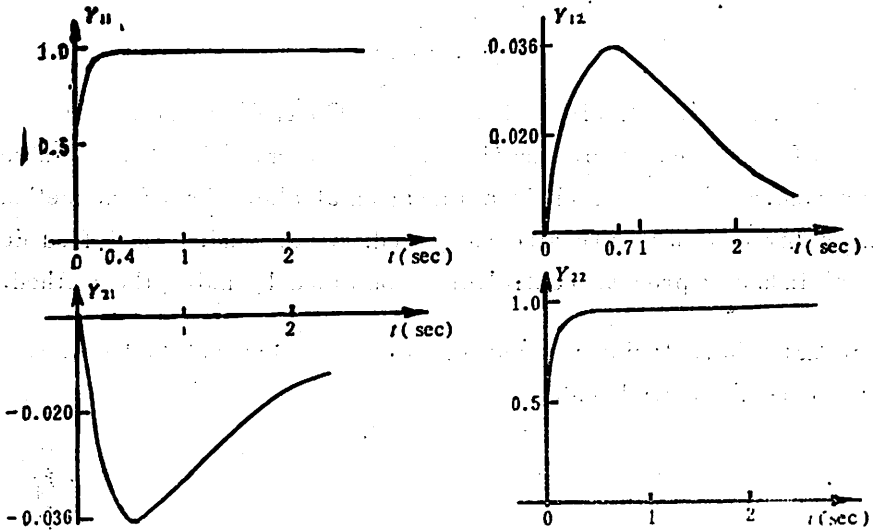


图 6 闭环系统的单位阶跃响应

参 考 文 献

- [1] Owens, D. H., *Feedback and Multivariable System*, London. Peter Peregrinus, 1978, 190-204.
- [2] MacFalane, A. G. J., Kouvaritakis, B., *Int. J. Control*, Vol. 25, 837-879.
- [3] MacFalane, A. G. J., Belletrutti, J. J., *Automatica*, 9 (1973), 575-588.
- [4] 庞国仲, 李高文, *国外自动化*, 36 (1985), 58-64.

The Characteristic Loci—Commutative Controller Method

Pang Guozhong Pu Hongjun

(Department of System and Management Science)

Abstract

The Characteristic Loci—Commutative Controller method is a efficient technique of the design of multivariable system. This paper introduces a algorithm named ALIGN which is a fundamental algorithm of the method. Some procednres for designing are also suggested. At the end, a satisfied design of a chemical industry process controller is obtained by using the method.

Key words: characteristic transfer function, characteristic loci, integraty, misalignment-angle, alignment.

分析湍流间歇性的双流体模型

范维澄 郑丽丽

(工程热物理系)

摘 要

本文阐述湍流的双流体模型,并用于计算湍流自由射流的间歇性。还研究了两种流体间的质量交换和摩擦作用对间歇性的影响。计算结果令人鼓舞。

关键词: 湍流模型, 两相流, 数值计算。

1 引言

湍流间歇性是湍流流体与非湍流环境的相互作用过程中常常表现出来的一种特性。例如烟囱中冒出的烟气与与大气相互作用,湍流射流与环境中的非湍流体的相互作用等等。它们的共同点是:在两种流体相互作用的区域内,两种流体在空间共存,在其中任一给定的空间位置上,两种流体各自以一定的几率出现。深入研究湍流间歇性,对正确认识湍流脉动对均流参数的输运,对发展流体力学的理论和分析方法,对揭示可能出现的传热、传质和化学反应,进而对解释和预测有趣的实验现象,都会产生重要的影响。

七十年代初期以来,湍流间歇性的实验和理论研究发展很快。Becher等(1967)^[1],Antonia等(1975)^[2],Chevray等(1978)^[3]和Shepherd等(1981)^[4]先后对湍流流动、传热和燃烧现象中的间歇性进行了成功的实验研究。条件取样技术(conditional sampling technique)使人们能够在同一空间位置上区分不同流体的流动状态和热力学状态,为湍流间歇性的实验研究提供了有效的测量手段。

Spalding(1971)^[5,6]基于对湍流燃烧过程中脉动量统计特性的分析,提供了计算湍流射流扩散火焰的 $k-\epsilon-g$ 模型及守恒量 f 瞬时值的双 δ 型几率分布,定量地求出了靠近射流外缘处非湍流流体出现的几率及其随空间位置的变化。在当时湍流模型的范围内,创造了一条定量计算湍流间歇性的途径。但这种分析方法忽略了非湍流流体作为一种连续介值所具备的输运特性(对流和扩散)的影响,也忽略了湍流流体和非湍流流体之间可能存在的各方面的相互作用(质量、动量、能量和化学反应),计算结果不可能十分接近实际。

1986年7月8日收到,

基于对大量实验现象的观察和归纳, 针对前述分析方法的不足, 运用处理两相流的数学方法^[6,7], Spalding 在 1982 年提出了分析湍流流动、传热传质和燃烧过程的双流体模型^[8,9]。本文的目的主要在于阐述双流体模型的学术思想、理论轮廓和通用方法, 并以分析在静止环境中的等温湍流自由射流的间歇性为例, 介绍用双流体模型处理实际问题的基本过程。

2 湍流的双流体模型

所研究体系常常可以归纳为由两种流体构成, 例如烟囱中冒出的烟和周围的大气, 非湍流环境中的湍流自由剪切流的边界区域等等。构成体系的两种流体都可分别按连续介值处理, 每种流体由一组运动的和热力学的状态参数来表征, 这些状态参数的变化由两种流体各自的控制微分方程组来描述。一般情况下, 控制方程组由连续性方程、动量方程、能量方程和表示化学组分变化的组分方程构成。这就是说, 为完整地描述两种流体构成的流动体系, 必须求解两套通常意义下的流体力学基本方程, 显然这两套方程组之间是相互耦合的。

两种流体在空间共存, 是在一定时间间隔和一定空间范围内平均的概念。它可以理解成在空间的一个点上两种流体各自以一定的几率出现; 也可以理解成某一时刻在有限的空间范围内, 两种流体各自占据该空间的一部分, 即有各自的体积分数, 显然

$$r_1 + r_2 = 1$$

式中 r_i 表示第 i 种流体出现的几率或占据的体积分数。下标 i 可取 1 或 2。

这种两相共存的概念在数值分析中是完全可以接受的, 因为在对积分区域离散化的过程中, 时间步长和空间网格都是有限的, 不可能无限小, 所以数值分析中的量实质上本来就是有限时间间隔和有限空间范围内的平均值。

两种流体之间在一定条件下会发生各种形式的相互作用。例如: 湍流流体可能通过对非湍流流体的卷吸, 使部分非湍流流体转化成湍流流体, 这就是两种流体间的质量交换; 两种不同速度的流体间的粘性作用及传质会带来两种流体间的动量交换; 不同温度的两种流体间的换热及传质会带来两种流体间的能量交换; 在一定条件下两种流体之间还会发生化学反应。研究双流体模型的重要任务之一就是探索这种相互作用的规律及相应的数学表达式。

研究和发展双流体模型的途径是把体现该模型的数值解与实验数据作对比, 因此提出和构造合理而可靠的数值分析方法, 使人们能求出控制方程组的合理数值解是双流体模型得以验证和发展的关键。Spalding (1980)^[10]在以前 SIMPLE^[11]方法的基础上, 针对两相流问题的数值分析, 提出了“相间滑移算法”(IPSA: Interphase Slip Algorithm), 并编制了相应的大型通用程序 PHOENICS (凤凰程序)^[12], 为双流体模型的研究提供了有效的数学工具。

3 湍流自由射流基本方程

考虑一个无限大静止环境中的定常等温平面湍流自由射流, 在射流的边界处有明显的湍流间歇。在研究体系中的任一点, 非湍流流体和湍流流体各自以一定时间分数出现, 这里把湍流流体出现的时间分数定义成湍流间歇因子 r , 作为湍流间歇性的度量。 $r=1$ 意味着全部是湍流流体; $r=0$ 表示全部是非湍流流体,

根据第二节中阐述的双流体模型的设想和常用的对边界层类型流动的处理方法，可以推导出控制湍流自由射流运动状态变化的微分方程组。

1) 连续性方程:

湍流流体 (下标为 1)

$$\frac{\partial(\rho_1 r_1 u_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_1 r_1 v_1)}{\partial y} = m_{21}$$

非湍流流体 (下标为 2)

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 u_2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_2 r_2 v_2)}{\partial y} = -m_{21}$$

2) 主流方向 (x) 动量方程:

湍流流体

$$\frac{\partial(\rho_1 r_1 u_1^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_1 r_1 u_1 v_1)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[r_1 \left(-\rho_1 \overline{u_1' v_1'} + \mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) \right] - r_1 \frac{\partial P}{\partial x} + F_{21} + u_2 m_{21}$$

非湍流流体

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 u_2^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_2 r_2 u_2 v_2)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(r_2 \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) - r_2 \frac{\partial P}{\partial x} + F_{12} - u_2 m_{21}$$

与主流垂直方向的动量方程可简单简化为压力场均匀。

式中 m_{21} 表示第二种流体在卷吸作用下转化为第一种流体的速率; F_{ij} 表示第 i 种流体施加在第 j 种流体上的作用力; $(-\rho \overline{u'v'})$ 表示湍流的雷诺应力。

鉴于射流和环境的温度和压力均匀不变, 可以认为压力梯度为零, 密度均匀不变, $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ 。为使控制方程组封闭, 必须给出 m_{21} 、 F_{ij} 和雷诺应力的表达式。可以设想 m_{21} 和 F_{ij} 都应当与两种流体当地速度的差值有关, 与两种流体各自出现的时间分数有关。作为一种尝试, 假设

$$\begin{aligned} m_{21} &= K_m r_1 r_2 \rho |u_1 - u_2| \\ F_{21} &= K_f r_1 r_2 \rho |u_1 - u_2| (u_2 - u_1) \\ F_{12} &= K_f r_1 r_2 \rho |u_1 - u_2| (u_1 - u_2) \end{aligned}$$

式中 K_m 和 K_f 为比例常数, F_{21} 和 F_{12} 实际上是作用力和反作用力, 所以必然有

$$F_{21} = -F_{12}$$

雷诺应力的表达式可用湍流模拟的方法得到, 在湍流流体内部可以采用均相流中的各种湍流模型, 如雷诺应力方程模型, 湍流粘性系数中的零方程、单方程、双方程模型等等。作为第一步, 为简化计算本文采用均匀湍流粘性系数模型。

4 求解基本方程的数值方法^[10,6]

体现双流体模型的控制方程组的特点: 非线性、数目多、耦合性强。这个数学特征决定了控制方程组在通常情况下不可能用解析方法求解, 只能设法用数值方法求解。

把研究区域网格化和在该网格系统内对控制方程离散化是数值求解的第一步, 本文采用非均匀分布的固定交错网格系统, 用控制容积法和上风差分格式离散化控制微分方程, 构造有限差分方程组。差分方程在形式上是线性的, 但由于差分方程系数中隐含因变量, 方程实

质上是非线性的。这种实质上的非线性决定了需要采用迭代程序求解。由于方程的抛物型特征，可在主流方向上采用前进式积分，不必在该方向上反复扫描 (sweep)。迭代过程中采用了低松弛，计算表明，松弛因子的选取对收敛性影响很大。

本文的求解借助于移植的大型通用程序 PHOENICS—84，在中国科技大学计算机中心进行。对于 10×10 的网格系统，在 Honeywell DPS8/49 计算机上，计算一次约需 52 秒 (CPU)。

5 结果和讨论

图 1 给出了计算得到的射流某横截面上两种流体各自的速度和时间分数的分布。可以看出，在射流流体内部的相当大范围内，湍流流体的时间分数均小于 1，湍流间歇不仅仅限于射流的边界处；湍流间歇性从射流轴线到边界逐渐增强；两种流体的速度处处不同，非湍流流体的速度也在射流轴线处达到极大，这是两种流体动量交换的结果。

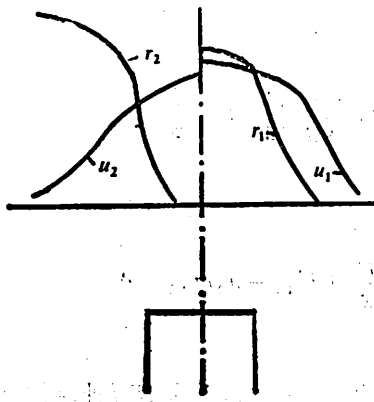


图 1

两种流体间质量交换和摩擦系数的影响分别示于图 2 和图 3。

不难发现，传质系数大时，湍流间歇性减弱；摩擦系数加大时，两种流体在同一空间位置的速度差下降，湍流间歇性增强。

上述计算结果在趋势上与实验数据相符，也与人们

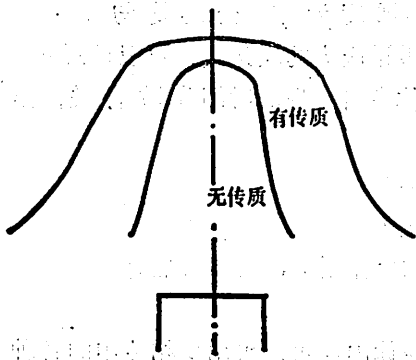


图 2 r 的分布

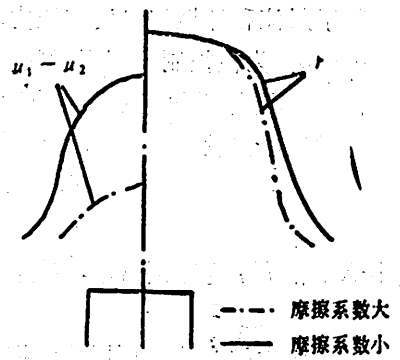


图 3 r 和 $(u_1 - u_2)$ 的分布

的理性分析一致。由于采用的两种流体间传质和动量作用的公式是演示性的，有待于实验检验，由于计算用网格不够精细，计算结果在定量上难免会有误差。

6 结论

本文阐述双流体模型的基本理论和方法，并以此对湍流自由湍流的间歇性进行了数值分析，计算结果合理。双流体模型为湍流间隙性的研究提供了有力的理论基础。

双流体模型为湍流流动、传热传质和燃烧问题的研究开辟了新的途径，目前刚刚兴起。与实验研究相结合，探索两种流体间各种相互作用的规律和数学模式是发展双流体模型的关键。

作者对提供 PHOENICS—84 计算程序的英国帝国理工学院的斯波尔丁教授表示深切感谢。

参 考 文 献

- [1] Becker, H. A., Hottel, H. C., Williams, G. C., *J. Fluid Mech.*, 30 (1967), 285—303.
- [2] Antonia, P. A., Prabhu, A., Stephenson, S. E., *J. Fluid Mech.*, 72/3 (1975), 455—480.
- [3] Chevray, R., Tutu, N. K., *J. Fluid Mech.*, 88 (1978), 133—160.
- [4] Shepherd, L. G., Moss, J. B., Measurements of Conditioned Velocities in a Turbulent Premixed Flame, AIAA 19th Aerospace Sciences Meeting, St Louis, Paper (1981), No. 81—0181.
- [5] Spalding, D. B., *Chemical Engineering Science*, 26 (1971), 95—107.
- [6] 范维澄, 计算燃烧学简程, 全国计算燃烧学讲习班讲义, 中国科技大学, 合肥, (1983).
- [7] Spalding, D. B., Numerical Computation of Multi-phase Flows, Imperial College Report, HTS/81/8, (1981).
- [8] Spalding, D. B., The Two-Fluid Model of Turbulence Applied to Combustion Phenomena, AIAA 22th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, (1984).
- [9] 范维澄, 流体流动, 传热传质和燃烧过程的计算机模拟——PHOENICS 程序的理论基础, 计算燃烧学讲习班讲义, 中国科技大学, 合肥, (1984)。
- [10] Spalding, D. B., IPSA: New Developments and Computed Results, Imperial College Report, HTS/81/2, (1981).
- [11] Spalding, D. B., Mathematical Modelling of Fluid-Mechanics, Heat-Transfer and Chemical-Reaction Processes: A Lecture Course, Imperial College Report, HTS/80/1, (1980).
- [12] Spalding, D. B., *J. Mathematics and Computers in Simulation*, 23 (1981), 267—276.

A Two-Fluid Model of Turbulence Applied to Intermittency of Turbulent Free Jet

Fan Weicheng Zheng Lili

(Department of Engineering Thermophysics)

Abstract

A two-fluid model of turbulence is presented and applied to predictions of the intermittency of turbulent free jets. The influences of interfluid mass transfer and interfluid friction on the intermittency are studied. The results obtained here are promising.

Key words: turbulence modelling, two-phase flow, predictions.

在 X 射线剂量测量中的电离室有效中心

李启明 冯正永 王明谦 孙腊珍

(近代物理系)

电离室在核物理发展的早期,曾起过极为重要的作用。五十年代以后,电离室和其它气体探测器一样,在许多方面的作用已被各种新型探测器(如闪烁探测器、半导体探测器等)所取代。但是,由于电离室所特有的性能(主要是低辐射损伤等),使它仍有较广泛的应用,尤其在高通量监测和剂量测量方面,电离室一直是最主要的探测器。

在 X 射线剂量测量中使用的电离室,大多为圆柱型或球型电流电离室。它们的输出电流正比于射线在室内产生的电离电流,也就是正比于射线的照射量率。由于空气的有效原子序数($z_{\text{空气}}=7.64$)与生物软组织的有效原子序数($z_{\text{肌肉}}=7.42$)相近,人们常常通过测量空气中的照射量率来推知生物体的吸收剂量率。在低能 X 射线剂量测量中,则多采用自由空气电离室。测量时,按照事先的标定,由输出电流读数得到所测 X 射线的照射量率。

本文目的在于讨论这种 X 射线剂量仪标定中的有效中心问题,并以圆柱型自由空气电离室为例,计算在顶照情况下它的有效中心位置与入射 X 射线能量的关系。

1 问题的提出

放射性强度为 A (Ci) 的点源在距源 R (cm) 处的照射量率^[1]

$$\frac{dX}{dt} = \frac{A\Gamma}{R^2} \quad (1)$$

X 为照射量,单位 r ; $\frac{dX}{dt}$ 即照射量率,单位 $\text{r}\cdot\text{s}^{-1}$; Γ 为照射量率常数,单位

$\text{r}\cdot\text{cm}^2\text{Ci}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

显然,照射量率是指空间某一点处所受辐照的强度。而当用自由空气电流电离室进行测量时,电离室内各点的照射量率是不同的,所以电流电离室的读出电流所对应的照射量率是整个电离室体积内各点照射量率的总效果。显然,在电离室内存在这样一点,该点的实际照射量率等于电离室的平均照射量率。因而称这个点为电离室的有效中心。由公式(1)知,有效中心位置的确定对于仪器标定和测量都是重要的。

1986年7月18收到。

但是这个有效中心的位置，由于常见手册和专著中没有提到，目前在计量、防护部门操作人员中并没有统一的明确认识。有人认为在圆柱长二分之一处，有人认为在三分之一处，有的提出按标定时定位点为准等等。从现今出厂电离室的标记看，大多数无有效中心位置标志。日本 DR-3 型仪器在电离室前约三分之一处有一标志，但该仪器同时用作 β 射线外照射剂量监测，对于 X 射线测量的有效中心是否合适尚需验证。

谭大刚同志曾从纯粹数学的角度讨论过顶照情况下圆柱型电离室的有效中心问题^[2]。他计算得到的结论是：

(a) 在平行入射时，有效中心即几何中心；

(b) 点源射线入射时，有效中心位置与几何中心位置有所偏离，即使在源距端面仅三倍电离室长度时，这种偏离也不大于 4%。

但是纯数学考虑作了太多的物理假设。文献 [2] 的推导实际上隐含了这样一个前提：电离室内各点的照射量率与该点到源的距离的平方成反比，而与 X 射线能量无关，在平行入射的情况下，各点的照射量率完全一致。这与已知的 X 射线穿过介质时服从的指数衰减规律不符合。只有当 X 射线能量比较大且电离室本身长度与其到源的距离相比很短时，上述假设才能近似满足。

2 X 射线平行入射时的有效中心

设一平行 X 射线束以顶照方式入射圆柱型电离室(图 1)。若取电离室前窗坐标为 $x=0$ ，电离室长为 l ，则从垂直于轴线的平面 x 中通过的 x 射线光子数为

$$N = N_0 e^{-\mu x} \quad (2)$$

式中 N_0 为入射到电离室端面的光子数， μ 为介质吸收系数。在图 1 中 $x-x+\Delta x$ 的薄层内与介质发生作用的光子数为

$$\Delta N = \mu N_0 e^{-\mu x} \cdot \Delta x \quad (3)$$

若以 ϵ 表示一个光子与介质作用时传递给介质的能量(在 X 射线能量很小时，由于光电效应占绝对优势，因此 ϵ 即该发生作用的光子的全部能量；而在 X 射线能量稍大以致康普顿效应不可忽略时，应把 ϵ 理解为大量光子光电效应和康普顿效应能量转移的统计平均)，则整个圆柱型介质 (0— l) 所吸收的总能量为

$$E = \epsilon \int_0^l \mu N_0 e^{-\mu x} dx = \epsilon N_0 (1 - e^{-\mu l}) \quad (4)$$

上述积分过程在 x 射线能量很小时，是精确的，但在 X 射线能量较大时，需引入假设，即光子康普顿散射后与介质再次作用的影响可予忽略，因而 μ 可以看作与 X 无关的常数。这个假设在电离室充的是自由空气介质且其线度不很大时，是满足的。

由 (4) 式，单位厚度层所吸收的平均能量为

$$\bar{E} = E/l = \frac{\epsilon N_0}{l} (1 - e^{-\mu l}) \quad (5)$$

设电离室有效中心位置为 x_0 ，由定义知，该点附近单位厚度层所吸收的能量与整个电离室的单位厚度层平均吸收能量相同，因而

$$\epsilon \mu N_0 e^{-\mu x_0} = \frac{\epsilon N_0}{l} (1 - e^{-\mu l}) \quad (6)$$

解之得

$$x_0 = \frac{1}{\mu} \ln \frac{\mu l}{1 - e^{-\mu l}} \quad (7)$$

我们以 $l=10\text{cm}$ 代入 (7) 式计算得到不同能量的平行 X 射线束顶照入射时圆柱型自由空气电离室的有效中心位置, 结果示于图 2. 可见在我们所讨论的条件下, 在入射 X 射线能量大于 8keV 时, 电离室有效中心非常接近于几何中心. 而在能量小于 5keV 时, 有效中心与几何中心位置的偏离已超过 5% . 能量越低, 偏离越显著. 虽然目前使用的多数 X 射线剂量

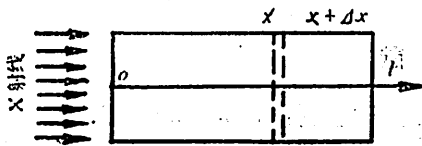


图 1 平行 X 射线束以顶照方式入射圆柱型电离室

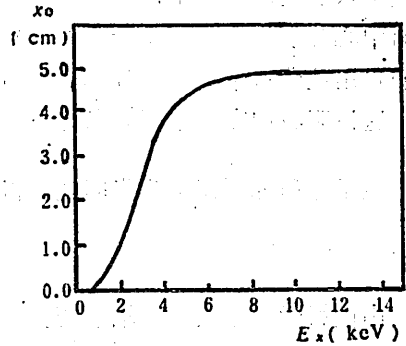


图 2 平行入射 X 射线顶照条件下, 自由空气电离室 (室长 $l=10\text{cm}$) 的有效中心位置 x_0 随 X 射线能量的变化

仪^[3]的程范围为 10keV 以上, 在平行入射时把几何中心认作有效中心是完全可以的, 但目前辐射防护工作已需研制小于 10keV 的低能 X 射线剂量仪, 因此, 有效中心问题应引起足够注意.

3 点源顶照入射时的有效中心

在点源顶照入射时, 虽然原则上可以仿照平行入射时的方法作解析推导, 但是实际推导将非常复杂, 而且所推导得到的式子也很难求解. 然而这类问题的蒙特卡罗解法却非常便当. X 射线入射电离室后与室有效体积内介质的相互作用及所产生次级电子对介质分子的电离作用, 是进行蒙特卡罗模拟的物理基础. 为讨论方便等我们作如下简化:

- (1) 电离室前窗极薄, 近似无窗;
- (2) 壁材料的影响可以忽略, 这在空气等效壁时是很好的近似;
- (3) 由于射线与电离室外空气作用而产生的散射光子、散射电子的影响可以忽略.

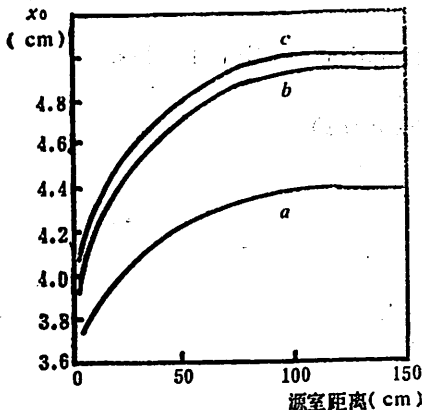


图 3 点源顶照条件下, 自由空气电离室 ($\phi 8.0 \times 10.0$) 的有效中心位置 x_0 随源室距离的变化 $a - E_s = 5\text{keV}$, $b - E_s = 10\text{keV}$, $c - E_s = 50\text{keV}$

至此, 我们可以仿照文献 [4] 的办法

推导有关计算公式和设计程序框图,所用公式和程序框图与文献[4]大致相同,本文不再赘述。计算中用的电离室参数($\phi 8.0 \times 10.0 \text{cm}$)与文献[3]所列各类电离室相近。计算结果示于图3。图中三条曲线分别表示不同能量的X射线入射时,有效中心位置随着点源到室距离的变化。

由图3可见,随着源室距离的增大,电离室有效中心逐渐趋近于平行束入射时的有效中心。当源室距离大于1m后,源室相对位置的变化对于有效中心位置的影响已可忽略,即此时可将点源入射近似看作平行射线束。而在源室距离为30cm(即3倍室长)时,有效中心偏离几何中心分别为4% ($E_x = 50 \text{keV}$)、5.5% ($E_x = 10 \text{keV}$)和9.7% ($E_x = 5 \text{keV}$)。

我们也用此蒙特卡罗程序计算了平行射线束的有效中心,所得结果与图2的解析计算结果相同,这说明我们在作平行束条件下的解析推导过程中所作的假设是合理的。

上海原子核研究所研究生张明健、肖亚斌曾参加本工作讨论, 謹致谢意。

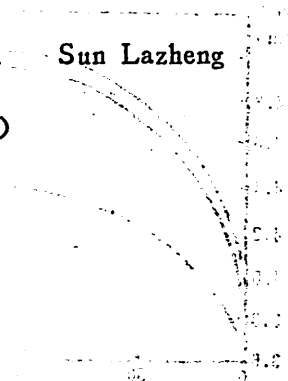
参 考 文 献

- [1] 中国科学技术大学, 辐射防护, 中国科学技术大学教材, 1981, 29—43.
- [2] 谭大刚, 关于圆柱电离室标定、测量中有效中心位置的理论计算和讨论, 全国第一届放射医学与防护学术交流会议论文集, 1980.
- [3] SZ—766型 $x \cdot \gamma$ 射线剂量仪说明书, 辽阳市低压电器厂, 1978; FJ—365型 x 射线剂量仪使用说明书, 国营262厂, 1975.9; 法国Babyline 20型便携式电离室型剂量仪说明书(中译本); 日本DR—3型剂量说明书(中译本)。
- [4] 冯正永等, 中国科学技术大学学报, 16(1986), 249.

The Effective Center of Ionization Chamber in Measurement of X-Ray Dosage

Li Qimin Feng Zhengyong Wang Mingqian Sun Lazheng

(Department of Modern Physics)



等离子体拍波加速器中的激光束自聚焦

汪秉宏 G. Schmidt

(中国科技大学)

(美国斯蒂文斯理工学院)

粒子的激光加速最近受到广泛的注意。由 Tajima 和 Dawson^[1] 提出的等离子体拍波加速器是一种很有应用前景的方案。这一方案的基本思想是, 在等离子体中输入两束频率略有不同的激光, 从而激发大振幅的等离子体拍波。拍波的相速度等于激光束的群速度 $c\sqrt{1-(\omega_p/\omega)^2}$, 其中, ω , ω_p 分别是激光和等离子体朗缪尔振荡的频率。因为 $\omega_p \ll \omega$, 因而等离子体拍波的相速度接近于光速 c 。又由于等离子体密度可以高达 $10^{17} - 10^{18} \text{cm}^{-3}$, 等离子体拍波的波长 $2\pi c/\omega_p$ 很小, 而这正是产生使粒子得以加速的静电场的特征距离, 因此等离子体拍波加速器中的加速场将大大超过现有的直线加速器或同步加速器, 可以把粒子加速到接近于光速的更高的能量。

使用这种新概念的拍波加速器, 用不着在尺寸上做得很大, 但这也带来了激光与等离子体的相互作用区是有限尺寸的限制^[2]。为了获得所希望的高强度激光, 就必须把激光束聚焦到半径为 a 的一个很小的斑点。真空对于激光束是散焦的, 大约经过瑞利长度 $a^2 k$ 之后, 原来光强的大部分就损失掉了。然而等离子体作为非线性介质存在着自聚焦的可能性。

主要考虑两种非线性效应。激光束与等离子体相互作用的有质动力效应是一种非线性效应^[3], 但这种过程的时间尺度是离子振荡周期 ω_p^{-1} , 这对拍波加速器来说是太长了。等离子体振荡电子的相对论效应是另一种非线性效应, 其时间尺度是电子振荡周期 ω_{pe}^{-1} , 因此这种非线性效应在拍波加速器的短时间尺度内是有效的。一个简化的模型可以说明正是这种相对论效应引起的非线性提供了激光束自聚焦的可能, 并给出自聚焦的激光功率要求。

电子在等离子体磁波中的运动方程是

$$\frac{d}{dt}(\gamma \mathbf{V}) = -\frac{e}{m} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{V}}{c} \times \mathbf{B} \right) \quad (1)$$

其中 $\gamma = 1/\sqrt{1-V^2/c^2}$ 是相对论因子。如果 \mathbf{E} 的极化方向在 $\hat{\mathbf{X}}$, \mathbf{B} 的极化方向在 $\hat{\mathbf{Y}}$, 则波在 $\hat{\mathbf{Z}}$ 方向以相速度 $V_p \approx c$ 传播。

从麦克斯韦方程 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ 可知 $B = \frac{kc}{\omega} E = \frac{c}{V_p} E \approx E$, 因此运动方程 (1)

的分量形式

$$\frac{d}{dt}(\gamma V_x) = V_x \dot{\gamma} + \gamma \dot{V}_x = -\frac{e}{m} E \left(1 - \frac{V_x}{c}\right) \quad (2a)$$

$$\frac{d}{dt}(\gamma V_y) = V_y \dot{\gamma} + \gamma \dot{V}_y = 0 \quad (2b)$$

$$\frac{d}{dt}(\gamma V_z) = V_z \dot{\gamma} + \gamma \dot{V}_z = -\frac{e}{m} E \frac{V_z}{c} \quad (2c)$$

其中
$$\dot{\gamma} = \gamma^3 \frac{V_x \dot{V}_x + V_y \dot{V}_y + V_z \dot{V}_z}{c^2} \quad (3)$$

把 (3) 代入到 (2) 中诸式可以得到 \dot{V}_x , \dot{V}_y , \dot{V}_z 的线性方程组:

$$\left(1 + \gamma^2 \frac{V_x^2}{c^2}\right) \dot{V}_x + \gamma^2 \frac{V_x V_y}{c^2} \dot{V}_y + \gamma^2 \frac{V_x V_z}{c^2} \dot{V}_z = -\frac{eE}{m\gamma} \left(1 - \frac{V_x}{c}\right)$$

$$\gamma^2 \frac{V_x V_y}{c^2} \dot{V}_x + \left(1 + \gamma^2 \frac{V_y^2}{c^2}\right) \dot{V}_y + \gamma^2 \frac{V_y V_z}{c^2} \dot{V}_z = 0$$

$$\gamma^2 \frac{V_x V_z}{c^2} \dot{V}_x + \gamma^2 \frac{V_y V_z}{c^2} \dot{V}_y + \left(1 + \gamma^2 \frac{V_z^2}{c^2}\right) \dot{V}_z = -\frac{eE}{m\gamma} \cdot \frac{V_z}{c}$$

对小量 $\beta = V/c$ 进行展开, 保留到 $\beta^2 = V^2/c^2$ 的量级, 可以得到

$$\begin{aligned} \dot{V}_x &= \frac{-eE}{m\gamma} \left[\left(1 - \frac{V_x}{c}\right) \left(1 + \frac{V^2 - V_x^2}{c^2}\right) - \frac{V_x}{c} \cdot \frac{V_x^2}{c^2} \right] / (1 + \gamma^2 \beta^2 + \dots) \\ &= -\frac{eE}{m} (1 - \beta^2)^{3/2} \left(1 - \frac{V_x}{c} + \beta^2 - \frac{V_x^2}{c^2}\right) \\ &= -\frac{eE}{m} \left(1 - \frac{V_x}{c} - \frac{3}{2} \cdot \frac{V_x^2}{c^2} - \frac{V_y^2 + V_z^2}{2c^2}\right) \end{aligned}$$

从 (2a) 及 (2c) 可以得到 $V_y/V_x \sim V_z/V_x \sim V_x/c$, 因此 $V_y^2 \sim V_z^2 \sim V_x^2 \beta^2$. 我们有

$$\dot{V}_x = -\frac{e}{m} E \left(1 - \frac{V_x}{c} - \frac{3}{2} \cdot \frac{V_x^2}{c^2}\right) \quad (4)$$

作相同量级的近似, 可以从 (2c) 得到

$$\dot{V}_z = -\frac{e}{m} E \frac{V_z}{c} \quad (5)$$

因此
$$V_x = -\frac{e}{mc} \int_0^t E(t') V_x(t') dt' \approx -\frac{e^2}{m^2 c^2} \int_0^t \left[E(t') \int_0^{t'} E(t'') dt'' \right] dt'$$

利用被积函数 $E(t') E(t'')$ 关于 t' , t'' 平面的对称性, 可以改变上式的积分区域, 而得到

$$V_x = -\frac{e^2}{2m^2 c^2} \left[\int_0^t E(t') dt' \right]^2 \quad (6)$$

从 (4) 又可得到

$$\frac{V_x^2}{c^2} = \frac{e^2}{m^2 c^2} \left[\int_0^t E(t') dt' \right]^2$$

把此式及 (6) 代入到 (4) 式即可得到

$$\dot{V}_s = -\frac{e}{m} E \left\{ 1 - \frac{2e^2}{m^2 c^2} \left[\int_0^t E(t') dt' \right]^2 \right\} \quad (7)$$

从电磁场麦克斯韦方程组

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (8)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$$

可以得到等离子体中的激光所遵循的波动方程

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\frac{4\pi en}{c^2} \dot{V} \quad (9)$$

对于频率为 ω 的激光, 方程可以写为

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \mathbf{E} = -\frac{4\pi en}{c^2} \dot{V} \quad (10)$$

把上面得到的结果 (7) 代入到 (10) 中, 即得

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \mathbf{E} = \frac{\omega_p^2}{c^2} \left\{ 1 - \frac{2e^2}{m^2 c^2} \left[\int_0^t E(t') dt' \right]^2 \right\} \mathbf{E} \quad (11)$$

由于喇曼散射效应, 等离子体电子朗缪尔振荡对于电磁波的调制, 波场可以写作如下形式:

$$\tilde{E}(\mathbf{r}, t) e^{i(\omega t - k z)}$$

其中 $\tilde{E}(\mathbf{r}, t)$ 是空间和时间缓变振幅, $\omega/k = c(1 - \omega_p^2/\omega^2)^{-1/2}$ 是等离子体中电磁波的相速度。在对迅变部分求时间平均后可以得到

$$\left[\int E dt \right]^2 = \frac{E^2}{2\omega^2} \quad (12)$$

空间变化可以分为平行方向和垂直方向的变化 $\nabla^2 E = (\nabla_{\perp}^2 + \nabla_z^2) E$, 其中平行方向的变化是

$$\nabla_z \tilde{E}(\mathbf{r}, t) e^{i(\omega t - k z)} = \left(-ik + \frac{\partial}{\partial z} \right) E \quad (13)$$

这里 $\partial E / \partial z$ 是由空间缓变部分 \tilde{E} 引起的, 因此

$$\left| \frac{\partial E}{\partial z} \right| \ll |kE| \quad (14)$$

从 (13) 显见 $\nabla_z^2 = -k^2 - 2ik \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, 把上述假定均代入 (11) 中, 波动方程化为

$$\left(\nabla_{\perp}^2 - k^2 - 2ik \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \right) E = \frac{\omega_p^2}{c^2} \left\{ 1 - \frac{e^2}{m^2 c^2 \omega^2} E^2 \right\} E$$

电磁波的色散关系 $\omega^2 = \omega_p^2 + k^2 c^2$ 将使其中三项相消, 于是得到非线性薛丁锶方程^[4]

$$\left(\nabla_{\perp}^2 - 2ik \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\omega_p^2}{c^2} \cdot \frac{e^2 E^2}{m^2 \omega^2 c^2} \right) E = 0 \quad (15)$$

这个方程的前两项描写的是波包色散, 把 $\nabla_{\perp}^2 \sim 1/a^2$ 代入可以得到瑞利长度。最后一项描写的正是激光的自聚焦。自聚焦占优势的条件是

$$\left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \frac{e^2 E^2}{m^2 c^4} > \frac{1}{a^2} \quad (16)$$

激光功率是

$$W = \frac{\pi}{2} a^2 \frac{E^2}{8\pi} c \quad (17)$$

自聚焦条件可以写为

$$16 \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \frac{r_0}{mc^3} W > 1 \quad (18)$$

其中 $r_0 = e^2/mc^2$ 是经典电子半径。由此条件得到的激光功率输入

$$W > \frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{\omega_p} \right)^2 \text{GW}$$

拍波加速器中通常假定 $(\omega_p/\omega)^2 \ll 1$ 。如果 $\omega/\omega_p \sim 5$ ，目前的二氧化碳激光器可以满足自聚焦条件所提出的功率要求。而对于文献 [5] 所建议的 5.1 TeV 的等离子体拍波加速器，若采用钕玻璃激光器： $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$ ， $\omega = 1.78 \times 10^{15}/\text{sec}$ ，从相位滑移考虑所得到的最佳等离子体频率是 $\omega_p = 7.20 \times 10^{12}/\text{sec}$ ，则 $\omega/\omega_p \sim 247$ ，为达到激光束在等离子体中的自聚焦，激光功率必须高于 30 TW。这并不太难实现。

从上述分析可以看到，在未来的等离子体拍波加速器中，激光与等离子体相互作用的相对论性非线性效应，提供了激光束自聚焦的一种机制。只要激光功率输入超过一定的阈值，激光束自聚焦是可能的。

参 考 文 献

- [1] Tajima, T., Dawson, J. M., *Phys. Rev. Lett.*, 43 (1979), 267.
- [2] Lawson, J. D., *Beat Wave Accelerators*, First Report of the RAL Study Group, RL-83-057, (1983).
- [3] Schmidt, G., *Physics of High Temperature Plasma*, Ch. IX, Academic Press, USA, (1979).
- [4] Davidson, R. C., *Methods in Nonlinear Plasma Theory*, Academic Press, USA, (1972).
- [5] Ruth, R. D., Chao, A., *Laser Acceleration of Particles* (Ed. Channell, P. J.), Los Alamos, 1982, AIP Conference Proceedings, No. 91, New York, 1982.

Self Focusing of Laser Beams in the Plasma Beat-Wave Accelerator

Wang Binghong

(University of Science and Technology of China)

George Schmidt

(Stevens Institute of Technology, USA)

Hill 变分原理的推广

何竹修

(近代力学系)

引言

Hill 的刚塑性流动理论变分原理, 带有三个约束条件: 平衡方程、屈服条件和力边界条件。满足这些条件的容许应力当中, 真实的应力使泛函取极小值。在利用这个原理解题时, 第一步是按上面三个约束条件假设容许应力, 这一点是很难办到的, 因此它给解题带来极大的困难。本文将 Hill 的泛函, 加以推广, 采用拉氏乘子法, 提出新的泛函, 不再受到任何约束。按它去假设容许解就非常方便了。根据新泛函的极值条件, 可采用里兹法或伽辽金法求近似解, 或用有限元法求数值解。

1 基本方程与 Hill 变分原理

假设刚塑性体全部处于塑性状态, 任一问题应满足下列诸方程:

(1) 平衡方程

$$\sigma_{ii,i} + \bar{f}_i = 0$$

(2) 屈服条件

$$\sigma'_{ij}\sigma'_{ij} = 2k^2$$

(3) 应力—应变速率关系

$$\sigma'_{ij} = \frac{\sqrt{2}k}{\sqrt{\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij}}} \dot{\epsilon}_{ij}$$

(4) 应变速率—位移速度关系

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i})$$

(5) 不可压缩条件

$$\dot{\epsilon}_{ii} = 0$$

(6) 边界条件

$$\sigma_{ij}n_j = \bar{T}_i \quad (\text{在 } S_\sigma \text{ 上})$$

1986年12月19日收到。

$$\begin{aligned}
 & - \iiint_V (v_{i,i} \delta \sigma_{i,i} + v_{i,i} \delta \sigma_{i,i,i}) dV = \iint_{S_0} (v_i - \bar{v}_i) n_i \delta \sigma_{i,i} dS \\
 & - \iiint_V \frac{1}{2} (v_{i,i} + v_{i,i}) \delta \sigma_{i,i} dV - \iiint_V v_i (\delta \sigma_{i,i})_{,i} dV \quad (b)
 \end{aligned}$$

将 (b) 式代入 (a) 式得

$$\begin{aligned}
 \delta \pi^* = & \iiint_V \left(\sigma_{i,i} - \frac{\sqrt{2k}}{\sqrt{\dot{\epsilon}_{i,i} \dot{\epsilon}_{i,i}}} \dot{\epsilon}_{i,i} - \frac{1}{3} \sigma_{i,i} \delta_{i,i} \right) \delta \dot{\epsilon}_{i,i} dV + \iiint_V (\sigma_{i,i,i} + \bar{f}_i) \delta u_i dV \\
 & + \iiint_V v_i (\delta \sigma_{i,i})_{,i} dV + \iiint_V (\sigma'_{i,i} \sigma'_{i,i} - 2k^2) \delta \lambda dV + 2 \iiint_V \lambda \sigma'_{i,i} \delta \sigma'_{i,i} dV \\
 & - \frac{1}{3} \iiint_V \dot{\epsilon}_{i,i} \delta \sigma_{i,i} dV + \iint_S (\sigma_{i,i} n_i - \bar{T}_i) \delta v_i dS + \iint_S (v_i - \bar{v}_i) n_i \delta \sigma_{i,i} dS \\
 & + \iiint_V \left[\dot{\epsilon}_{i,i} - \frac{1}{2} (v_{i,i} + v_{i,i}) \right] \delta \sigma_{i,i} dV = 0
 \end{aligned}$$

由 δv_i 在体内的任意性有

$$\sigma_{i,i,i} + \bar{f}_i = 0, \quad \text{因而得} \quad (\delta \sigma_{i,i})_{,i} = 0$$

由 $\delta \lambda$ 在体内的任意性有

$$\sigma'_{i,i} \sigma'_{i,i} = 2k^2, \quad \text{因而有} \quad 2\sigma'_{i,i} \delta \sigma'_{i,i} = 0$$

由 $\delta \dot{\epsilon}_{i,i}$ 在体内的任意性有

$$\sigma_{i,i} - \frac{1}{3} \sigma_{i,i} \delta_{i,i} = \frac{\sqrt{2k}}{\sqrt{\dot{\epsilon}_{i,i} \dot{\epsilon}_{i,i}}} \dot{\epsilon}_{i,i}$$

即

$$\sigma'_{i,i} = \frac{\sqrt{2k}}{\sqrt{\dot{\epsilon}_{i,i} \dot{\epsilon}_{i,i}}} \dot{\epsilon}_{i,i}, \quad \text{因而有}$$

$$\dot{\epsilon}_{i,i} = 0 \quad (\text{因 } \sigma'_{i,i} = 0)$$

由 $\delta \sigma_{i,i}$ 在体内的任意性有

$$\dot{\epsilon}_{i,i} = \frac{1}{2} (v_{i,i} + v_{i,i})$$

由 δv_i 在 S_0 上的任意性有

$$\sigma_{i,i} n_i - \bar{T}_i = 0$$

由 $\delta \sigma_{i,i}$ 在 S_0 上的任意性有

$$v_i = \bar{v}_i$$

由新泛函的驻值条件, 得到了刚塑性问题的全部控制方程。

3 结论

用广义泛函解题时, 因不受任何约束条件, 对变量 v_i 、 $\dot{\epsilon}_{i,i}$ 及 $\sigma_{i,i}$ 可随意选取, 然后用 $\delta \pi^* = 0$ 求近似解。

参 考 文 献

- [1] Hill, R., *Mathematical Theory of Plasticity*, Oxford, 1950, 66—67.
- [2] Washizu, K., *Variational Methods in Elasticity and Plasticity*, 3rd Edition, Pergamon Press, 1982, 397—398.
- [3] 钱伟长, 广义变分原理, 知识出版社, 上海, 1985, 301—303.
- [4] 钱伟长, 变分法和有限元 (上册), 科学出版社, 北京, 1980, 589—591.
- [5] 何竹修, Hill 塑性变分原理的修正, 第三届华东固体力学学术讨论会报告, 单印本, 1986.

Generlization of Hill's Variational Principle

Her Jurshiou

(Department of Modern Mechanics)

安徽铜陵铜官山矿田火成岩的 同位素地质年龄

周泰禧

李学明

赵俊深

张富陶

(中国科学技术大学)

(安徽省 812 地质队)

1 前言

安徽铜陵铜官山矿田出露了以中性岩类为主的火成岩体。较大的有西湖岩体、金口岭岩体、铜官山岩体、天鹅抱蛋山岩体和虎山岩体，它们约占基岩出露面积的五分之一。许多研究者认为铜官山矿与岩体的侵入有密切关系，研究岩体的侵入时代对本区成矿作用有重要意义^[1-3]，因此在六十年代中期就开展了同位素地质年龄测定工作^[4,5]。近年来，我们采用钾—氩法、氩—氩法和铀—钍—铅法进行了同位素地质年龄测定。

供年龄测定的样品均采自岩芯和露天采场，样品基本上是新鲜的。从有代表性的全岩样品中选出黑云母和角闪石供氩—氩测定，该实验由陈江峰同志在美国俄亥俄州立大学完成。钾—氩年龄测定为陈道公同志在美国地质调查所门罗公园实验室完成。铀—钍—铅分析是彭子成同志在美国地质调查所丹佛实验室完成。钾—氩法计算年龄采用常数

$$\lambda_{\alpha} = 0.581 \times 10^{-10} / \text{年}, \lambda_{\beta} = 4.962 \times 10^{-10} / \text{年}.$$

2 地质概况

铜官山矿田构造属下扬子褶皱带中部的贵池—繁昌凹断褶皱束的一部分，它正好被夹在江南地轴和淮阳地盾这两个前寒武纪结晶基底之间的早古生代拗陷带中，火成岩体就侵入在这些地层构成的褶皱里。围岩为志留系碎屑岩到三迭系碳酸盐岩地层（图1）。

因湖水淹没和表土覆盖，西湖岩体出露不全，它可能与金口岭岩体属一个岩体，两者均沿北东向侵入到金口岭向斜中，为石英闪长岩。

铜官山岩体、天鹅抱蛋山岩体和虎山岩体均侵位在铜官山倒转背斜中。铜官山岩体为石英闪长岩，出露面积 1.5 平方公里。松树山、庙基山、小铜官山、老山和宝山等几个铜矿的露天采场在其东南接触带上。天鹅抱蛋山岩体属浅成小岩株，出露面积约 0.8 平方公里，以闪长岩为主，局部相变为石英闪长岩，东南部接触带的外带离岩体 50—100 公尺有马山金矿，

岩体与碳酸盐岩地层接触处有零星砂卡岩和硫铁矿体分布。虎山岩体更小，为闪长玢岩，强烈绿帘石化，与石灰岩接触处亦有砂卡岩化并有小型铁矿。

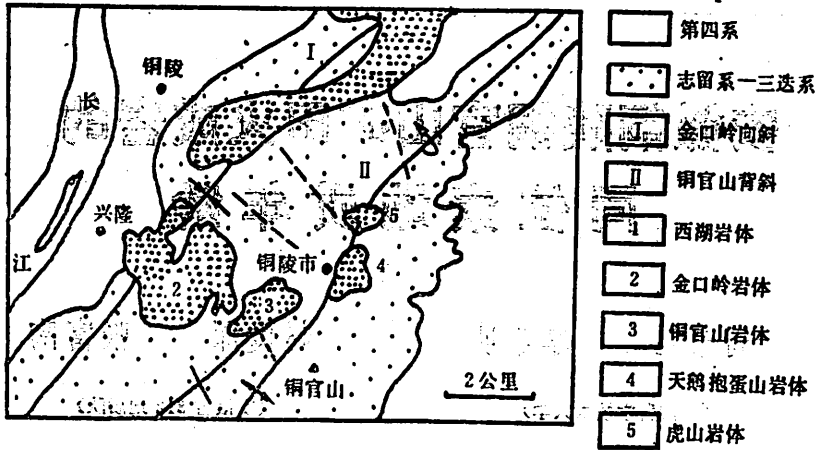


图 1 铜官山矿田火成岩体分布图

3 测定结果和讨论

3.1 钾—氩法测定

为讨论方便起见，我们称金口岭山顶南面出露的大片石英闪长岩为金口岭岩体，金口岭山顶以北断续出露的石英闪长岩体划为西湖岩体。西湖岩体中取了两个黑云母样（年-2，年-5）。从表 1 中可看出两样品表面年龄相差 5 百万年。根据本区其他岩体的测定结果，野外产状和岩性变化，它可能是一个杂岩体，各部分侵位略有先后，早的部分是 140.2 百万年，晚的部分是 135.3 百万年。

表 1 钾—氩年龄测定值

顺 序 号	样 品 编 号	采 样 地 点 及 地 质 特 征	测 定 对 象	K (%)	大 气 氩 (%)	年 龄 值 (m.y.)	测 定 年 月	
1	马—1	鹅头山正北约 500m 处 33 线露采场 (天鹅抱蛋山闪长岩体)	黑云母	71.7	0.008245	136.6	1981.9	
				6.71	9.95	0.008345	138.2	1981.11
2	马—2	青石山南东约 500m 处 CK342 占孔 (天鹅抱蛋山闪长岩体)	黑云母	6.23	11.1	0.008183	135.6	1982.10
3	年—2	铜陵市北西 CK-2 占孔 (西湖石英闪长岩体)	黑云母	7.64	23.38	0.008471	140.2	1982.12
4	年—5	铜陵市西北 CK-3 占孔 (西湖石英闪长岩体)	黑云母	7.47	28.8	0.009162	135.3	1982.12

天鹅抱蛋山岩体南部出露较好，中间被水淹没。分别在南部的露天采场和北部的 CK342

占孔取样(马-1, 马-2)。前者被测两次共获得三个数据(见表1)。比较三个数据, 考虑到测量误差, 采用平均年龄137百万年作为天鹅抱蛋山岩体的侵位年龄。

3.2 氩-氩法测定

在金口岭岩体的中心取了一个大样, 从中选取黑云母(年-7)。在铜官山岩体中取了两个大样, 从中选出角闪石。氩-氩法测定结果, 黑云母和角闪石的 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 年龄谱很相象, 年龄谱具有很好的一致性, 给出的坪表示 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 年龄未经扰动, 即基本上没有后期热事件影响, 说明岩浆侵位后冷却结晶过程相当快。金口岭岩体黑云母给出的 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 坪年龄(T_p)是137.3百万年, 见表2, 图2。铜官山岩体角闪石的 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 坪年龄是136.9百万年^[6], 因此

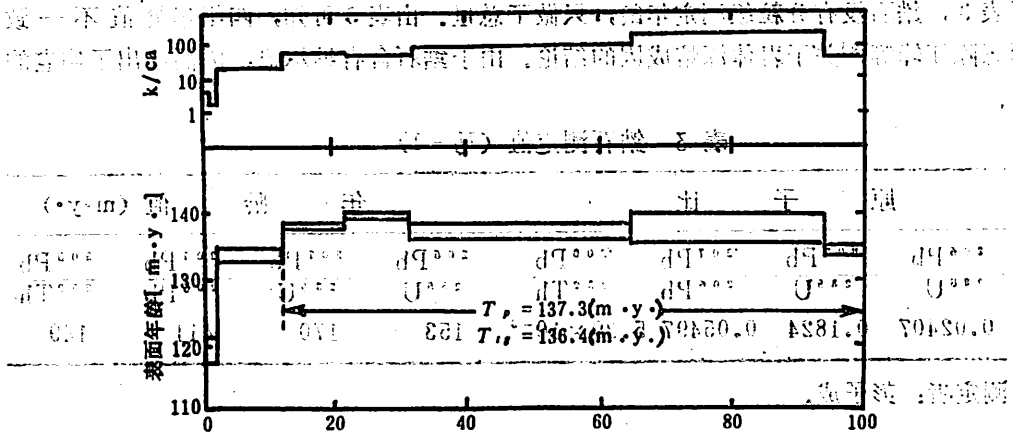


图2 金口岭岩体黑云母的 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 年龄坪谱

表2 金口岩体 $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ 分析数据*

温度 ($^{\circ}\text{C}$)	$\frac{^{40}\text{Ar}}{^{39}\text{Ar}}$	$\frac{^{36}\text{Ar}}{^{39}\text{Ar}}$	$\frac{^{37}\text{Ar}}{^{39}\text{Ar}}$	F	$^{40}\text{Ar}_{\text{rad}}$ (%)	$^{39}\text{Ar}_{\text{rad}}$ (%)	$\frac{\text{K}^{40}}{\text{Ca}^{40}}$	表面年龄 (T_t) (m.y.)
500	0.1917	0.4385	0.1598	6.1831	32.25	0.50	4.58	06.659
600	0.8268	0.1942	0.4424	7.6811	92.88	1.75	1.63	119.317
675	0.9393	0.2422	0.3224	8.6411	91.99	9.91	2.24	133.690
650	0.9380	0.1344	0.1268	8.9454	95.37	9.48	5.69	138.223
825	0.9486	0.1490	0.1503	9.0082	94.96	9.56	4.80	139.157
900	0.9128	0.7851	0.9181	8.8581	97.05	33.31	7.85	136.924
1015	0.1048	0.5225	0.3382	8.8947	84.90	29.30	2.10	137.469
熔融	0.9325	0.2085	0.1521	8.6720	92.99	6.19	4.66	134.151
				8.8245	91.40	100.00	3.72	136.423

分析者: 陈江峰。

* 样号年-7; 样品名称黑云母; $J=0.008902$

用 137 百万年作为这两个岩体的侵入年龄。

陈江峰等采用铷—锶法测定过铜官山岩体的年龄，但铷—锶全岩数据不构成好的等时线，不能精确地给出它的年龄，而数据与由铀—钍法测定得的 137 百万年基本吻合并给出初始 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 比值为 0.70738^[6]。

虎山岩体由于遭受较强的绿泥石化作用，无法取得新鲜标本。据陈民扬(1972)测定^[4]，全岩样给出的年龄是本区最年轻的，为 99 百万年，另从野外地质产状和成矿作用的特征来分析，这个年龄值是可靠的。

3.3.3 铀—钍—铅法测定

从天鹅抱蛋山岩体马—1 号样品中，分离出锆石做了铀—钍—铅法年龄测定。测定数据列于表 3，锆石没有分粒级测定年龄，只做了总量。由表 3 可知，四组年龄值不一致，作者同意陈江峰等^[6]关于岩体深熔成因的结论。由于锆石含有继承铅，因而给出了偏老的表面年龄。

表 3 锆石测定值(马—1)

原 子 比				年 龄 值 (m.y.)			
$\frac{^{206}\text{Pb}}{^{238}\text{U}}$	$\frac{^{207}\text{Pb}}{^{235}\text{U}}$	$\frac{^{207}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}$	$\frac{^{206}\text{Pb}}{^{232}\text{Th}}$	$\frac{^{206}\text{Pb}}{^{238}\text{U}}$	$\frac{^{207}\text{Pb}}{^{235}\text{U}}$	$\frac{^{207}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}$	$\frac{^{206}\text{Pb}}{^{232}\text{Th}}$
0.02407	0.1824	0.05497	5.29×10^{-3}	153	170	411	149

测定者：彭子成。

如将该锆石数据投到不一致曲线图解上，取下交点为 137 百万年（钾—氩法年龄），得上交点年龄为 17 亿年（图 3），此年龄很可能代表基底岩石的年龄，它与陈江峰等同志由铷同位素模式年龄估计的古代岩石重熔的结论大体一致。

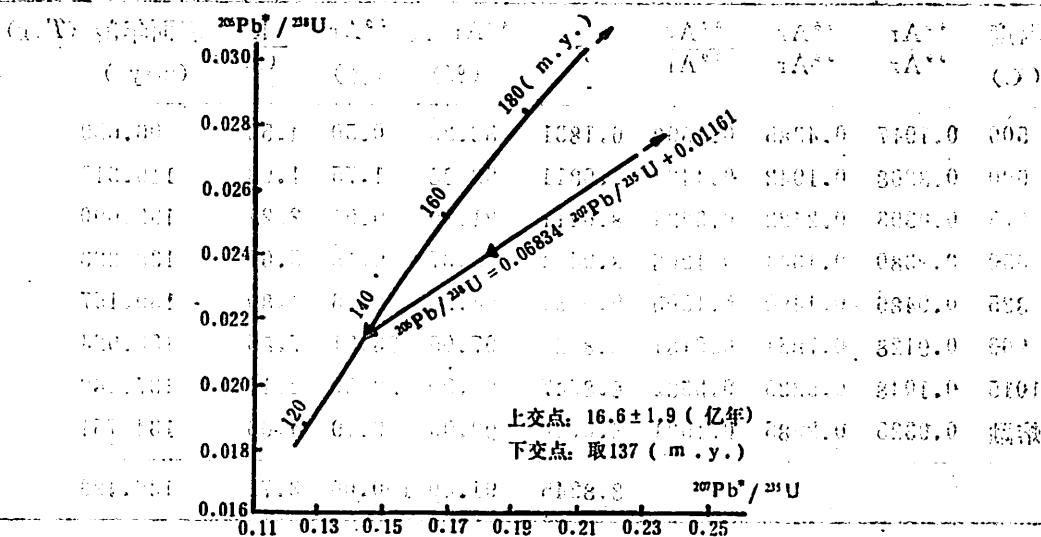


图 3 锆石不一致曲线图解

4 结论

(1) 铜官山矿田的火成岩体(西湖岩体、金口岭岩体、铜官山岩体、天鹅抱蛋山岩体)年龄值在135—140百万年,属燕山期的产物,即在侏罗纪末白垩纪初时侵位。

(2) 几个岩体可能是同源岩浆侵入到不同构造部位结晶冷却而成,岩浆冷却迅速,没有后期的热扰动事件。

参加本文野外工作的还有季连华同志,样品加工和单矿物分离由苏立洛、金致效、李彬贤、张巽同志完成,陈道公、彭子成、陈江峰同志帮助测定各项同位素地质年龄数据并对本文提出宝贵意见,没有他们的热心帮助和辛勤劳动,本文是无法完成的,在此一并表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] 南京大学地质学系, 华南不同时代花岗岩类及其与成矿关系, 科学出版社, 1981, 52—95.
- [2] 全国同位素地质年龄数据汇编(第二集), 地质出版社, 1977, 4.
- [3] 桂林冶金地质研究所同位素地质组, 砂卡岩铜矿专题组, 地质与勘探, 1974, No. 1, 14—23.
- [4] 湖北省地质科学研究所同位素地质研究室, 地球化学, 1974, No. 1, 32—41.
- [5] 全国同位素地质年龄数据汇编(第一集), 地质出版社, 1975, 117.
- [6] Chen Jiangfeng, Foland, K. A., Zhou Taixi, The Crust—the Significance of Granites Gneisses in the Lithosphere (Eds Wu Liren, et al.), Theophrastus Publications Athens, S. A., 1985, 217—237.

Geochronology of Igneous Rocks from the Tongguanshan Ore Area of Anhui Province

Zhou Taixi Li Xueming

(University of Science and Technology of China)

Zhao Junshen Zhang Futao

(The 812 geological team of Anhui Province)

马山金矿的同位素组成

李学明 李彬贤 张 巽 周泰禧

(地球和空间科学系)

1 地质概况

马山金矿位于安徽省铜陵市区的东北端。其构造属扬子拗褶带中部的贵池—繁昌凹断褶皱束的一部分，矿体产在铜官山背斜的东南翼。金矿地表出露二迭系、三迭系，深部有泥盆系，石炭系地层，除泥盆系和石炭系下统为碎屑岩外，其余均为碳酸盐岩。金矿就产在碳酸盐岩中^[1]。矿体紧邻天鹅抱蛋山闪长岩体，稍远有铜官山石英闪长岩体，它们的形成年龄都是137百万年^[1]，这两个岩体与碳酸盐岩层接触均形成矽卡岩和铁、铜矿化。

目前发现的30余个大小金矿体均以硫化物的形式赋存。主要富集层位是黄龙组上、下段之间的分界面，其次是高骊山组、黄龙组、船山组三个组顶部的层间裂隙，矿体呈似层状、透镜状、少数脉状。金主要以自然金、银金矿产在黄铁矿、黄磁铁矿中。微量金的分析表明，本区区域地层含金量正常，矿区31个碳酸盐岩样品的平均值为3.6ppb，与地壳金的丰度值3.5ppb相一致。天鹅抱蛋山岩体12个样品的平均含金量为11.4ppb，是R. W. Boyle等(1979)统计的261个中性岩样品的平均值3.6ppb的三倍。

2 同位素组成分析

2.1 铅同位素分析

为探讨成矿物质来源，测定了矿体中的方铅矿(顺序号1, 2)、接触带矽卡岩中的方铅矿(顺序号3)、矿体的近矿围岩(顺序号6—13)和岩体(顺序号4, 5)的铅同位素组成，这些数据列于表1。

从表1可以看出，矿体中3个矿石铅同位素组成比较稳定(顺序号1—3)，变化小于0.3%，具有典型的中生代整合硫化矿床铅同位素组成。

B. R. 多伊(1970)在研究美国蒙达拿的布特、犹他州宾厄姆峡谷以及不列颠哥伦比亚地区的一些岩浆成因矿床时，作过硫化矿石 $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 及 $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 对 $^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$ 坐标图，用同位素比值的一致性，说明硫化矿床中方铅矿与火成岩体有成因关系^[2]。同样，我们也将表1中的分析数据作成 $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 及 $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 对 $^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$ 坐标图

1985年1月7日收到。

1) 1) 安徽冶金地质勘探公司812队，1979，铜官山矿田马山金矿床地质简况。

表 1 马山金矿方铅矿和岩石的铅同位素分析结果

顺序号	样品号	采样位置及名称	铅同位素组成		
			$^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$	$^{207}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$	$^{208}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$
1	马—1	似层状矿体中的方铅矿	18.22	15.34	38.43
2	马—2	脉状矿体中的方铅矿	18.78	15.74	39.11
3	砂—3	接触带砂卡岩中的方铅矿	18.42	15.74	39.48
4	天—4	闪长岩 (南部)	18.30	15.77	40.14
5	天—5	闪长岩 (北部)	18.19	15.60	39.84
6	80—13	棲零灰岩	20.07	17.26	41.65
7	80—15	船山灰岩	18.75	15.47	38.73
8	80—16	黄龙灰岩	19.08	16.52	40.33
9	80—17	黄龙白云岩	18.83	16.08	39.28
10	80—54	棲零灰岩 (近矿围岩)	19.60	16.41	40.49
11	80—53	船山灰岩 (近矿围岩)	20.37	16.01	39.53
12	80—51	黄龙灰岩 (近矿围岩)	19.33	16.45	40.74
13	80—49	黄龙白云岩 (近矿围岩)	18.54	16.02	39.62

分析者: 陈移之等。

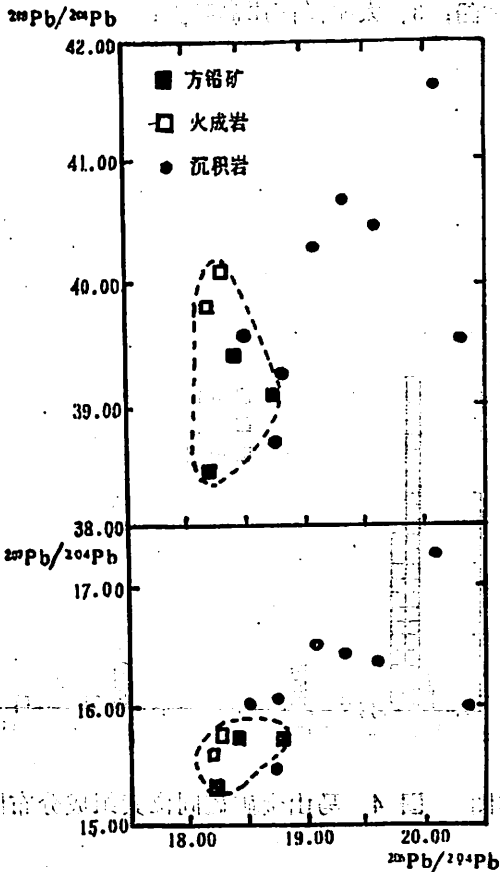


图 1 马山金矿铅同位素组成坐标图

(图1)。图上明显表示, 8个沉积岩岩石铅的点很分散, 3个方铅矿矿石铅的同位素比值很集中, 而且和天鹅抱蛋山闪长岩岩石铅同位素比值一致, 点集中在一起。按 B. R. 多伊的观点, 这种一致性说明金矿与岩体有成因关系。

为研究成矿时代, 对金矿中与含金黄铁矿共生的方铅矿进行了测定。采用 Russell-Stanton-Farguhur 模式, 计算方铅矿矿石铅的模式年龄, 得平均值 135 百万年 (表2)。尽管显生代方铅矿的模式年龄有较大误差, 但仍可作为金矿成矿时代的近似值。这个模式年龄与天鹅抱蛋山岩体的形成年龄 137 百万年有良好的吻合, 这种吻合从时间上提供了两者成因联系的信息。

为了进行同位素示踪比较, 陈毓蔚等^[1]将现代中央海岭玄武岩铅、西太平洋沿岸岛弧铅以及现代海洋化学沉积和锰结核铅同位素组成在 $^{207}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$ — $^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$ 图上画出分布范围, 并画出海岛铅同位素的分布趋向线。我们亦将马山金矿的矿石铅和火成岩体的铅同位素数据在该图上作图, 结果见马山金矿的点大致落在岛弧铅分布范围内, 具有岛弧铅的同

位素组成特征 (图 2, 3)。同时, 陈毓蔚等还指出, 我国中生代方铅矿同位素组成上的一个特点是, 凡与岩浆活动有关的矿床同位素组成变化范围小, 而与岩浆活动没有明显关系的分布范围较大。从表 1 看出, 马山金矿同位素组成变化范围小, 说明它与岩浆活动有关。

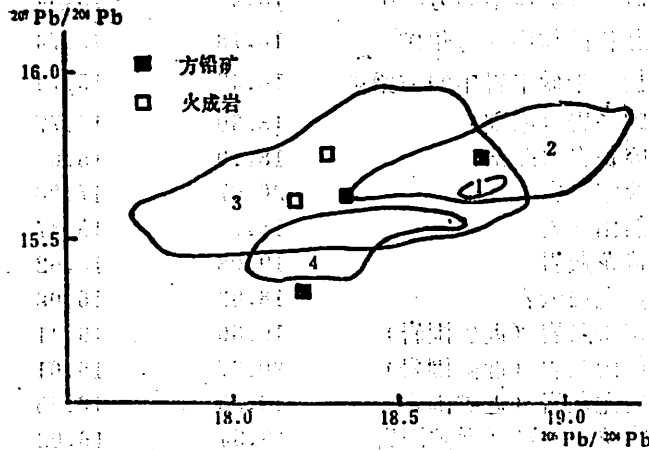


图 2 马山金矿 $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ — $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 作图

1. 现代铅; 2. 海洋化学沉积与锰结核铅;
3. 太平洋西岸岛弧铅;
4. 中央海岭拉斑玄武岩铅

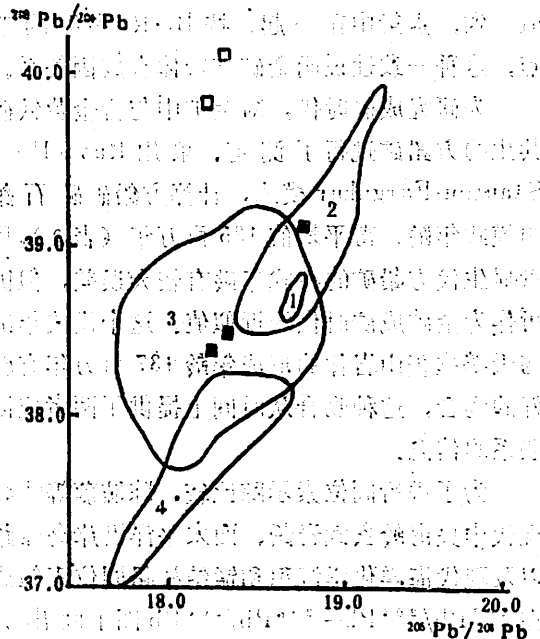


图 3 马山金矿 $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ — $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 作图

1. 现代铅; 2. 海洋化学沉积与锰结核;
3. 太平洋西岸岛弧铅; 4. 中央海岭拉斑玄武岩铅

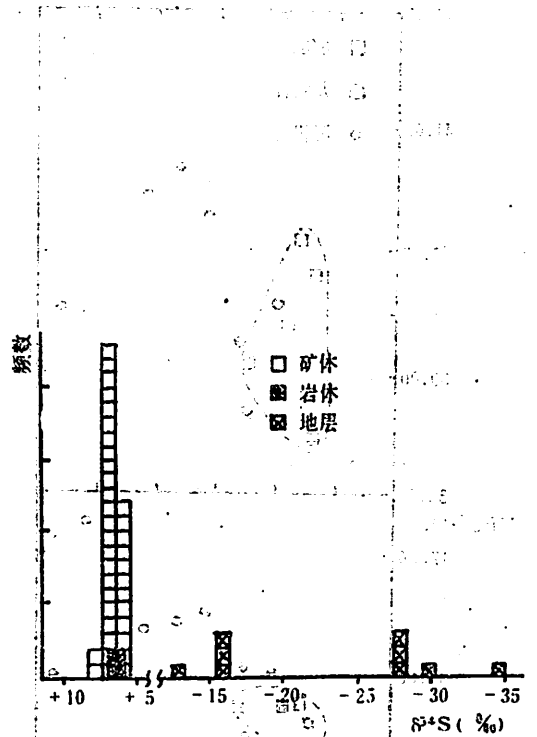


图 4 马山金矿硫同位素组成分布图

表 2 方铅矿测定值 (马—3)

	$^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$	$^{207}\text{Pb}/^{208}\text{Pb}$	$^{206}\text{Pb}/^{208}\text{Pb}$	$^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$	$^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$	平均
铅同位素比值	18.340	15.618	38.528	1.1743	0.47602	
年龄值(m.y.)			158	112		135

测定者: 彭子成。

2.2 硫同位素分析

作者测定了天鹅抱蛋山岩体和石炭系地层的硫同位素组成。为了对比还收集王义文等在本区所测的硫同位素资料, 制成表 3, 并根据表 3 作硫同位素组成分布图 (图 4)。从图可以

表 3 马山金矿及其外围硫同位素数据

地质产状	测定矿物	样品数	$\delta^{34}\text{S}(\%)$	资料来源
金矿体	黄铁矿	14	+6.9	1)
金矿体	黄铁矿	4	+7.23	2)
金矿体	磁黄铁矿	7	+6.43	2)
金矿体	胶状黄铁矿	4	+6.70	2)
金矿体	闪锌矿	2	+7.80	2)
金矿体	毒砂	2	+6.00	2)
金矿体	黄铜矿	1	+6.50	2)
天鹅抱蛋山岩体	黄铁矿	1	+6.22	作者
天鹅抱蛋山岩体	磁黄铁矿	1	+5.86	作者
石炭系高驷山组	黄铁矿	3	-28.28	作者
石炭系黄龙组	黄铁矿	1	-35.4	3)
石炭系船山组	黄铁矿	1	-13.0	3)
二迭系棲零组	黄铁矿	1	-29.6	3)
二迭系龙潭组	黄铁矿	3	-15.83	4)

1) 王义文, 1979, 中国北东部主要金矿床同位素地质学研究。

2) 王秀娟, 1981, 安徽铜陵马山硫金矿床矿物—地球化学特征及富集规律的初步研究。

3) 周真等, 1981, 铜陵马山金矿地质特征及成因探讨。

4) 席瑜等, 1984, 安徽贵池铜山铜矿床硫同位素组成的初步探讨。

清楚看出, 矿体与岩体的 $\delta^{34}\text{S}$ 值基本一致, 为 +6—+8, 地层的 $\delta^{34}\text{S}$ 值为负值, 且数据非常分散, 为 -13—-35, 与矿体显著不同。这一分布特征提供了矿体与岩体具有相同硫源的信息。

2.3 锶同位素分析

众所周知, 花岗岩类的 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 初始比值已作为判断其成岩物质来源, 并进而确定岩石成因的一个有效的同位素准则。作者认为岩浆侵入对马山金矿的形成有重要意义。故对紧邻矿体的天鹅抱蛋山岩体进行了锶同位素分析。供锶、铷同位素分析用的样品和分析铅同位素的样品为同一样品。铷和锶的含量由北京铷矿地质研究所分析; 地质部天津地质矿床研

究所作铷、锶的同位素分析。这些分析结果列于表4。初始值计算公式采用

$$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr} = (\text{Sr}^{87}/^{86}\text{Sr})_0 + ^{87}\text{Rb}/^{86}\text{Sr}(e^{\lambda t} - 1)$$

$$\lambda = 1.39 \times 10^{-11} \text{y}^{-1}$$

岩体年龄 t ，采用该岩体的钾—氩年龄 137 百万年。通过计算，天鹅抱蛋山岩体的 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 初始值为 0.70806 和 0.70805。

表 4 天鹅抱蛋山岩体全岩 Rb—Sr 同位素分析结果

样品号	采样位置	Rb (ppm)	Sr (ppm)	Rb/Sr	$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$	($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) ₀
天一4	岩体南部	79	876.8	0.09010	0.708553	0.70806
天一5	岩体北部	99.6	711.8	0.1399	0.708825	0.70805

分析者：甘璇玑、黄承义、彭子成。

陈江峰等^[1]采用 Sr、Nd 和 O 同位素技术对离马山金矿稍远的铜官山侵入体进行了研究，其 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 和 $^{143}\text{Nd}/^{144}\text{Nd}$ 初始比值分别为 0.7074 和 0.51195；全岩 $\delta^{18}\text{O}$ 值范围为 8.7—9.9%。他们根据铜官山侵入体具有高的锶初始比值和低的铷初始比值与高的 $\delta^{18}\text{O}$ 值，认为这些花岗质岩浆形成时，老地壳起主导作用，它们非常可能是由于地壳深熔作用而产生的。根据野外产状和岩性特征与接近的锶初始比值，天鹅抱蛋山闪长岩体和铜官山石英闪长岩体可能是同一古老地壳深熔作用的产物。

3 矿床成因讨论

据铅、硫和锶同位素研究，马山金矿不论是成矿时代，还是成矿物质来源（其中包括硫源）都表明它与本区岩浆活动有密切关系，具有热液成因的特点。同时野外产状与微量金的分布特点，也提供了佐证，即金元素是在燕山期时，由于老地壳的深熔作用随岩浆侵位被活化、转移带到地壳上部的，地层中的金元素对金矿的形成所起的作用是较小的。按中国金矿床成因类型讨论会提出的方案（1983），作者认为马山金矿应属重熔岩浆热液金矿床。

本工作在野外期间得到安徽省 812 队陈文拥、王秉衡、赵俊深工程师的帮助和指导，陈移之、彭子成、甘璇玑、黄承义等同志帮助测定各项同位素数据，陈江峰、陈道公同志对本文提出许多宝贵意见，作者在此表示诚挚的谢意。

- [1] Chen Jiangfeng, Poland K. A., Zhou Taixi, (eds. Wu Liren et al.): *The Crust—the Significance of Granites Gneisses in the Lithosphere* (Eds. Wu Liren, et al.), Theophrastus Publ. Athens, S. A., 1985, 217—237.
- [2] B. R. 多伊, 鉛同位素地质, 中国科学院地球化学研究所同位素地质研究室译, 科学出版社, 1970, 70—79.
- [3] 陈毓蔚等, 地球化学, 1980, No. 3, 215—229.

(中国科学院地球化学研究所)

Isotopic Compositions of Mashan Gold Deposits

Li Xueming Li Binxian
 Zhang Xun Zhou Taixi

(Department of Earth and Space Sciences)

摘要: 本文报道了湖南郴州市马山金矿床中含金石英脉的 Pb 同位素组成。分析结果表明, 该矿床的 Pb 同位素组成与地壳 Pb 同位素组成一致, 说明该矿床的成因与地壳 Pb 同位素组成有关。此外, 还报道了该矿床中含金石英脉的 U 同位素组成, 分析结果表明, 该矿床的 U 同位素组成与地壳 U 同位素组成一致, 说明该矿床的成因与地壳 U 同位素组成有关。

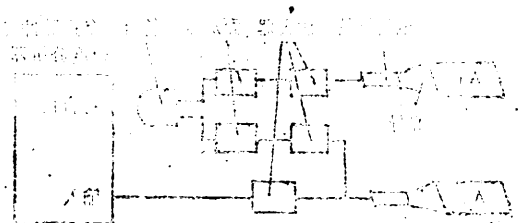


图 1 马山金矿床地质图

郴州市马山金矿床位于湖南省郴州市, 矿床类型为含金石英脉型。本文报道了该矿床中含金石英脉的 Pb 同位素组成, 分析结果表明, 该矿床的 Pb 同位素组成与地壳 Pb 同位素组成一致, 说明该矿床的成因与地壳 Pb 同位素组成有关。此外, 还报道了该矿床中含金石英脉的 U 同位素组成, 分析结果表明, 该矿床的 U 同位素组成与地壳 U 同位素组成一致, 说明该矿床的成因与地壳 U 同位素组成有关。

关键词: 马山金矿床, Pb 同位素组成, U 同位素组成

用 μ 子探测高楼重量

程纯杰

(地球和空间科学系)

1 引言

当初级宇宙线通过地球大气层时,产生各种次级射线。大约75%的次级射线是硬成分,绝大多数是 μ 子。通常, μ 子的强度随时间的变化小于1%,因而能够把它作为稳定的天然射线源。 μ 子穿透物质的能力很强,在3.400M.W.E.等效水深下还能探测到^[1],就是说高能 μ 子能到达地壳数公里深处。塑料闪烁体计数器望远镜能记录来自一定方向的 μ 子。

利用这种设想可做很多工作。例如,能测高层建筑物的重量、地铁或隧道上面所承受的载荷、海水的深度、水坝的重量,计算高山雪层到底含多少水,探测山区由可溶性石灰岩被水侵蚀后形成的溶洞。也可用于宇宙线物理探矿,粗略地估算矿层的轮廓和体积。为了验证上述设想可行的程度,现用塑料闪烁体计数器望远镜探测了 μ 子通过高楼后的强度变化,根据这个变化求出高楼的平均密度,粗略的估计了楼的重量,估算结果基本上和实际设计重量一致。

2 实验装置

自行研制的塑料闪烁体计数器望远镜的结构和工作原理,如图1所示。它主要由塑料闪烁体、光导、光电倍增管和电子学线路等四部分组成。 A_1 和 A_2 分别为 $400 \times 400 \times 10 = 16 \times 10^5 \text{mm}^3$ 塑料闪烁体探头。光导是由4号航空有机玻璃条,在烘箱中加温后扭曲 90° 并逐渐收缩成形,然后用胶粘而成的条状光导。光导的一端是扁平的,用胶和塑料闪烁体粘牢;光导的另一端是圆的,用硅油和光电倍增管耦合并用机械部分拉紧。为了更有效地把光子收集到光电倍增管的光阴极上,以及进行光屏蔽,塑料闪烁体探头和条状光导都用铝箔和黑色塑料布包起来。光电倍增管和前置放大器用

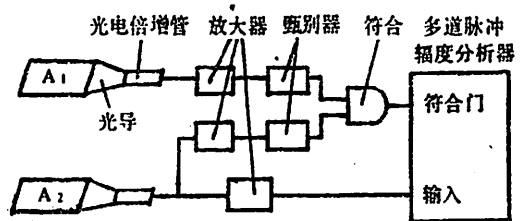


图1 μ 子塑料闪烁体计数器望远镜示意框图

1986年12月26日收到。

铝套管固定并密封起来，最后和电子线路联接，构成了塑料闪烁体计数器望远镜。

μ 子打在闪烁体上，在 高能情况下，穿过闪烁体，损失的一部分能量使闪烁体的原子（分子）电离、激发。受激原子（分子）在退激过程中，一部分能量用于发射光子。这些光子从发光位置开始，在闪烁体中传播，大部分光子经过表面的多次反射到达闪烁体和光导的界面，光子通过界面向光导传播，经过光导到达光电倍增管光阴极，被光阴极吸收后，发射出光电子。光电子在光电倍增管中倍增放大，在输出端被输出电容收集，形成一定幅度的电压脉冲。脉冲信号输入电子学仪器，经过放大、甄别、符合，由多道脉冲幅度分析器，把同时通过探头 A_1 和 A_2 的 μ 子事件记录下来。

3 测量结果和讨论

3.1 能量损失和强度的计算方法

μ 子穿过塑料闪烁体时，由于相互作用，把损失能量的一部分转变成光子信息。 μ 子能量损失率用下式^[1]表示：

$$-dE/dx = a + bE + c \ln\left(\frac{E'_m}{m_\mu c^2}\right) \quad (1)$$

公式中 a ， b 和 c 的值如下：

$$\text{岩石} - a = 1.84, \quad c = 0.076$$

$$\text{海水} - a = 1.75, \quad c = 0.085$$

b 项中包括电子对、韧致辐射、核相互作用效应，它的值在 200 GeV 时估算为

$$b = 2.5 \times 10^{-6} \text{ g}^{-1} \text{ cm}^2$$

m_μ 是 μ 子质量， E'_m 是对一个电子可传递的最大能量， E 是 μ 子的总能量。

(1) 式的第一项和第三项是电离、激发和契仑科夫辐射所造成的能量损失。在 200 GeV 以下其贡献占支配地位。第二项在比 200 GeV 能量更高的时候就不能再被忽略，而且随着能量的增加，其贡献越来越重要。

μ 子在深度 x 处的微分能谱用 $j(E, x)$ 表示，一个具有任何能量 μ 子的几率^[2]

$$J(E_0, x) = \int_0^\infty j(E, x) dE \quad (2)$$

公式中 E_0 是在深度 $x=0$ 时 μ 子的能量。如果 μ 子在 $x=0$ 时的能谱

$$j(E_0, 0) = j_0 dE_0 / E_0^{\beta+1}$$

那么深度 x 处的强度

$$I(x) = j_0 \int j(E_0, x) dE_0 / E_0^{\beta+1} = j_0 e^{-\beta x} M(\beta, -\beta, x) \Gamma(\beta) \quad (3)$$

式中， $M(\beta, -\beta, x)$ 是函数 j 的 Mellin 变换， $\Gamma(\beta)$ 是 Γ 函数； e 是不变的损失率（表示电离损失效应）， β 为谱指数。比较 μ 子在两个相同厚度的不同物质中的强度可以得到谱指数。

$$I_1(x) / I_2(x) = (e_2 / e_1)^\beta$$

由(3)看出强度~深度关系比较复杂，它和谱指数不是简单的指数关系，谱指数 β 随 μ 子能量变化而变化。而 μ 子穿透介质后能量的变化要用能量损失率来计算。

3.2 测量结果和重叠估算

以上分析可看出，强度~深度关系从理论上计算是相当复杂的，一般都从实验测出。

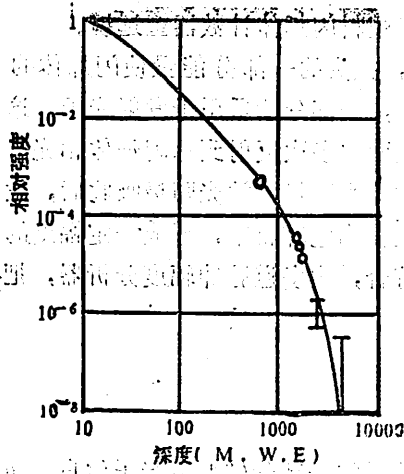


图 2 强度~深度关系曲线

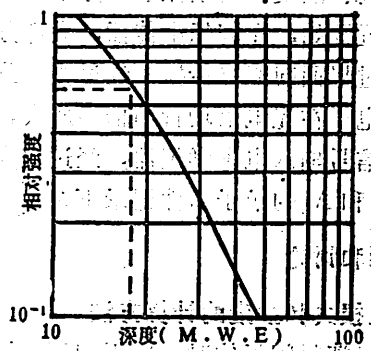


图 3 放大的强度~深度关系曲线

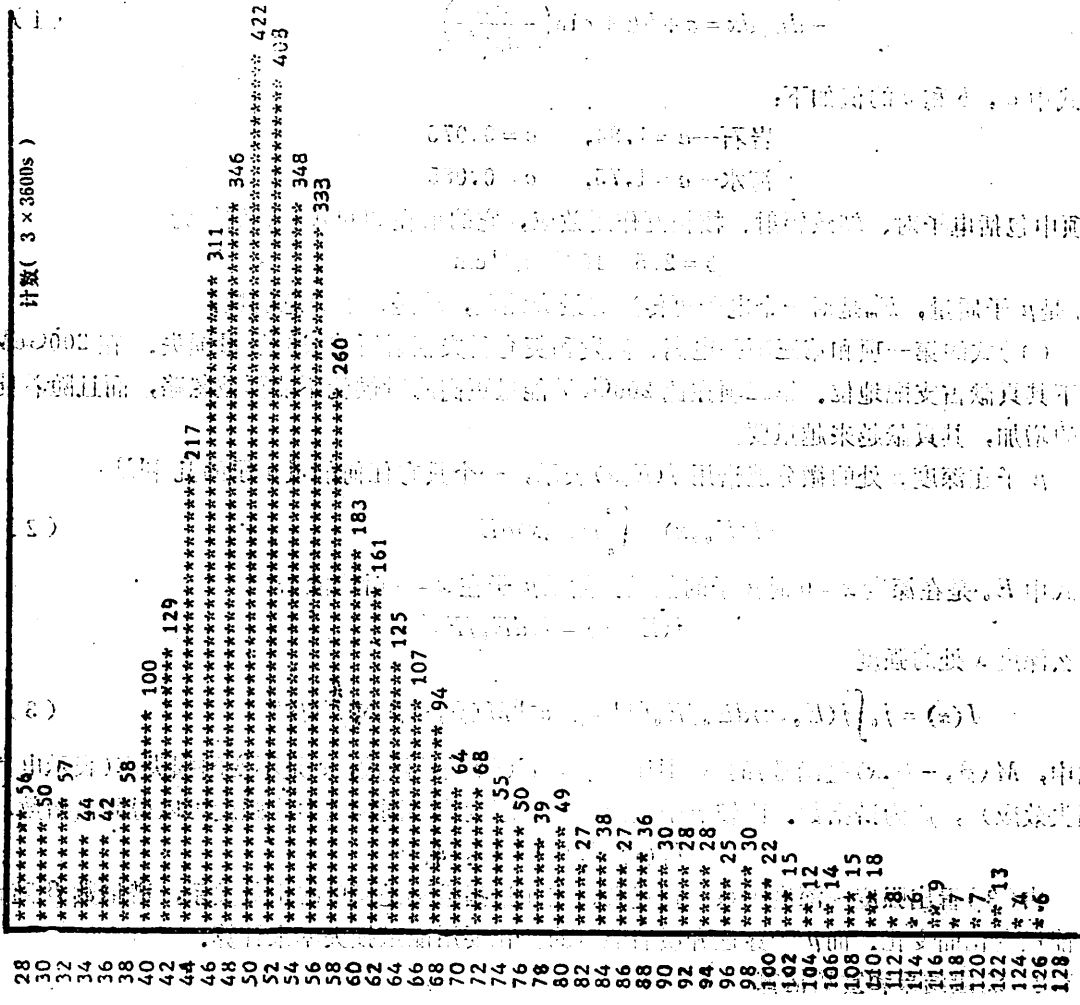
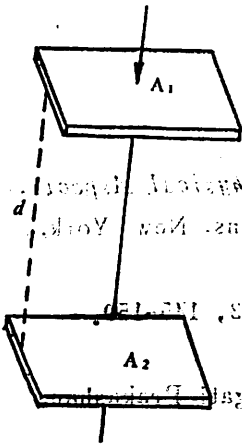


图 4 道数~计数曲线

图 2 是 Barton^[3] 在英国北部湖泊区岸边金矿用闪烁体计数器和 Geiger 计数器望远镜结合起来测得的结果。理论上计算的强度~深度关系曲线基本上与这个实验结果一致,由此,我们把 Barton 曲线作为估算高楼重量的依据。为了使用方便,把曲线在小深度部分进行放大,如图 3 所示。

曲线的横坐标表示深度,单位等效水深用 M.W.E. 表示, $M.W.E. = 100\text{gcm}^{-2}$ 。纵坐标是 μ 子的相对强度,把海平面 μ 子垂直强度 $0.83 \times 10^{-2} \text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}$ 的相对强度定为 1。



在中国科学技术大学物理楼一层,安装塑料闪烁体计数器望远镜,测量 μ 子的垂直积分强度。因为软成分基本上被七层建筑物所吸收,在两块塑料闪烁体之间没有铅吸收层。测得的数据用 3 小时的计数和道数表示,在图 4 给出。把 34 道前的计数看作噪声,36~128 道的计数作为 μ 子计数。在 36 道附近噪声和信号有些混合在一起。由图 4 可以看到,从 36 道开始信号迅速上升,而 36 道前的噪声是下降的。把 36 道前被噪声淹没的 μ 子计数,用 36 道后由于噪声提高的 μ 子计数来补偿,这样由噪声所引起的误差小于 1%。在 3 小时内测得的 μ 子总计数 $N = 4384$,每秒计数率 $a = N/t = 4.384 / (3 \times 3.600) = 0.406 \text{s}^{-1}$ 。

如图 5 所示,塑料闪烁体探头 A_1^2 和 A_2^2 之间的垂直距离 $d = 190\text{mm}$,因为 A_1 和 A_2 的几何尺度远小于 d ,所以立体角可用下面方法计算。 A_1 相对 A_2 上一个小面积元 dA_2 的立体角 A_1/d^2 。在垂直方向上通过面积 A_1 落到小面积元 dA_2 上的 μ 子通量

$$dN = I_{\perp} \frac{dA_2}{d^2} dA_1 \quad (4)$$

式中 I_{\perp} 为 μ 子的垂直强度。

对既通过塑料闪烁体面积 A_1 又通过 A_2 的 μ 子双重符合事件的计数率

$$n = \int \frac{I_{\perp} A_1 dA_2}{d^2} = \frac{I_{\perp} A_1 A_2}{d^2} \quad (5)$$

根据 (5) 式的计数率,就能计算出 μ 子的垂直积分强度

$$I_{\perp} = \frac{nd^2}{A_1 A_2} = \frac{0.406 \times 190^2}{40^2 \times 40^2} = 0.57 \times 10^{-2} \text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}$$

通过图 3 的强度~深度曲线,可以估算出在 $I_{\perp} = 0.57 \times 10^{-2} \text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}$ 时,楼的吸收深度为 17.6 M.W.E.,即 1760gcm^{-2} 。根据实验条件,望远镜在楼的顶部能扫到的面积为 100m^2 。深度 \bar{x} 可以代表楼的平均吸收深度。在楼顶上 μ 子垂直积分强度,取海平面强度 $0.83 \times 10^{-2} \text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}$,整个大气层的吸收深度取海平面的标准深度 1030gcm^{-2} 。这样从楼顶到第一层吸收深度变化

$$\Delta \bar{x} = 1760 - 1030 = 730\text{gcm}^{-2} = 7.3\text{Tm}^{-2}$$

科技大学物理楼地基长 80.9m,宽 14.3m,地基面积

$$S = 14.3 \times 80.9 \approx 1157\text{m}^2$$

楼的重量估算

$$G = S \times \lambda \approx 1.157 \times 7.3 \approx 8.500T$$

科大物理楼地基设计承载能力 $20Tm^{-2}$ 。这是在考虑安全系数 $k \approx 1.4 \sim 1.5$ ，活荷载、抗震、设备加上人的重量、楼本身的结构重量估算出来的。本文估算的重量是后项的和。估算的结果是 $7.3Tm^{-2}$ 即 $8.500T$ 。

本文工作比较粗糙。如果以楼顶测量值代替海平面公认的 I_1 ，则可以进一步降低由于噪声、讯号重迭所带来的误差和本工作测量条件限制所带来的系统误差。

本文采用了周志文、周大庄、程纯杰、马福胜所作的实验数据。

参 考 文 献

- [1] Hayakawa, S., *Cosmic Ray Physics. Nuclear and Astronphysical Aspects*, WILEY-INTERSCIENCE a division of John Wiley & Sons, New York, 1969, 390-402.
- [2] Hayakawa, S., *Prog. Thor. Phys. (Suppl.)*, 1964, No. 32, 145-150.
- [3] Barton, J. C., *Phil. Mag.*, 6 (1961), No. 70, 1271-1283.
- [4] Srivastava, B. N., *Basic Nuclear & The Cosmic Ray*, Pragati Prakashan, India, 1979-80, 478.
- [5] Sandstrom, A. E., *Cosmic Ray Physics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965, 65.

The Estimation of the Weight of High Building Using μ

Cheng Chunjie

(Department of Earth and Space Science)

用 X 射线荧光滤纸片法同时分析 七种单一稀土元素

赵贵文

唐予奇 毛振伟

(应用化学系)

(结构和成分分析中心实验室)

X 射线荧光簿样法是一种富有生命力的方法, 该法最大特点是能行之有效地消除基体效应^[1], 且背景低, 灵敏度高, 试样用量少, 能使 X 射线荧光分析推广到微量范围。

目前国内外应用较多的簿样法有两大类: 一类是簿膜法^[2], 另一类是滤纸片法^[3,4]。我们考察了现有的滤纸片法, 对日本 Murata 公司提出的成形滤纸片略加改进, 制成蜡脚滤纸片。这种滤纸片利用四只“蜡脚”支撑在空心的圆环支架上, 把待测溶液滴在滤纸片中心, 自然晾干后即可进行测定。由于这种滤纸上的待测溶液被限制在一定范围之内, 其扩散被阻止, 因此制样精度较好。我们用这种滤纸片测定了稀土元素 La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Y, 取得了较好结果。

1 实验部分

1) 采用日本岛津公司生产的 VF-320 X 荧光光谱仪。

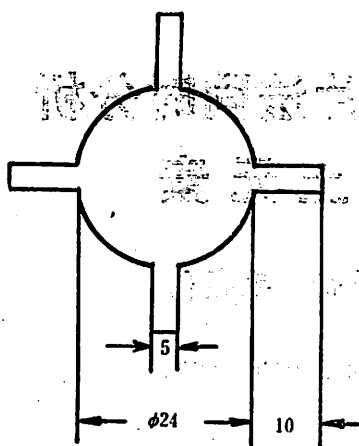
2) 仪器条件及谱线:

X 光管靶材	管压—管流	晶体	探测器	光路	积分时间		
铑(Rh)	40kV—60mA	LiF(200)	闪烁计数管	真空	100 s		
元素	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Gd	Y
谱线	$L\alpha_1$	$L\alpha_1$	$L\beta_1$	$L\beta_1$	$L\beta_1$	$L\beta_1$	$K\alpha$
2 θ	82.90	79.00	68.21	65.10	59.50	54.60	23.77
电平(V)	0.9	0.9	0.7	1.0	1.0	1.0	1.0
道宽(V)	2.2	2.1	2.3	2.4	2.1	2.1	2.2

1986年10月16日收到

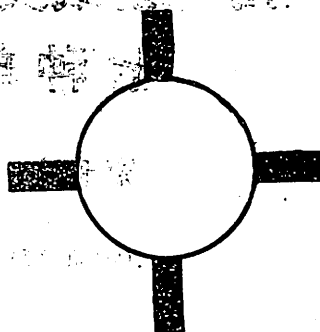
3) 四蜡脚滤纸片的制作:

我们用浙江新华造纸厂出产的快速定量滤纸, 用剪刀剪成如图 1 所示形状, 然后用电烙铁把石蜡熔在四条突出的“脚”上, 就制成了“四蜡脚滤纸片”(如图 2)。



单位 mm

图 1



阴影为涂蜡部分

图 2

利用四条突出的蜡脚将该滤纸片支撑在空心的圆环支架上, 用满刻度为 $50 \mu\text{l}$ 的微量进样器 (误差 $< 5\%$) 吸取 $50 \mu\text{l}$ 待测溶液, 滴在该滤纸片中心, 自然晾干后, 装入样品盒, 即可送入 X 荧光谱仪进行测定。

4) 背景^[5]和谱线干扰:

背景在一定程度上造成了分析线强度不真, 故常要进行背景校正。但按统计学观点, 背景校正也给分析结果带来新的误差。因用四蜡脚滤纸片进行测量时, 背景基本上保持不变, 故我们不进行背景扣除。

La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Y 元素的谱线干扰不太严重, 给工作带来了较大便利。我们选择了几条几乎不受干扰的谱线: LaLa_1 , CeLa_1 , $\text{PrL}\beta_1$, $\text{NdL}\beta_1$, $\text{SmL}\beta_1$, $\text{GdL}\beta_1$, $\text{YK}\alpha$ 作为分析线。

5) Compton 散射靶线内标^[6]:

分析线强度 I 受仪器漂移影响很大。我们用 X 射线铀靶的 Compton 非相干散射线作为内标, 以分析线强度 I 和散射线强度 I' 之比 I/I' 来代替 I, 这样在很大程度上能补偿仪器漂移的影响。

在下述条件下测定散射线内标值 I': $2\theta = 18.40^\circ$, 电平为 1.0V, 道宽为 2.2V, 其它条件同分析线。

2 结果与讨论

2.1 制样的重复性

配制 La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Y 的混合标准溶液, 同一样品各吸取 $50 \mu\text{l}$ 分别滴在六张四蜡脚滤纸片上, 测定 $I_r (= I/I')$, 求出变异系数。结果见表 1。

表 1 制样重复性

元素	溶液浓度 (ppm)	I_{R1}	I_{R2}	I_{R3}	I_{R4}	I_{R5}	I_{R6}	\bar{I}_R	σ	C.V.(%)
La	54.0	0.01959	0.02067	0.01984	0.01936	0.01893	0.02075	0.01986	7.3×10^{-4}	3.6
Ce	50.0	0.02242	0.02117	0.02203	0.02110	0.02166	0.02090	0.02155	5.9×10^{-4}	2.8
Pr	50.0	0.03455	0.03545	0.03290	0.03479	0.03343	0.03645	0.03460	1.3×10^{-3}	3.8
Nd	50.0	0.03448	0.03504	0.03520	0.03513	0.03493	0.03736	0.03536	1.0×10^{-3}	2.9
Sm	50.0	0.04344	0.04332	0.04395	0.04361	0.04272	0.04477	0.04364	6.9×10^{-4}	1.6
Gd	50.0	0.05166	0.05209	0.05256	0.05232	0.05007	0.05321	0.05198	1.1×10^{-3}	2.0
Y	50.0	0.21098	0.21286	0.21394	0.20919	0.20714	0.21612	0.21170	3.3×10^{-3}	1.5

表 1 中, 各元素的变异系数均小于 5%, 说明此法制样重复性符合要求。我们配制了其它浓度的混合标准溶液来测定的变异系数, 亦得到小于 5% 的结果。

2.2 标准曲线

将光谱纯稀土元素 La、Ce、Pr、Sm、Gd、Y 的氧化物用盐酸 (Ce 用盐酸 + H_2O_2) 溶解, 分别配成 0.1、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0 mg/ml 的标准系列溶液, 用微量进样器各吸取 $50 \mu l$ 于滤纸片上, 自然晾干后送入 X 荧光光谱仪测定, 以 I_R 对 C_m 作图, 即得标准曲线, 所得标准曲线线性良好, 见表 2。

表 2 标准曲线参数及相关系数

元素	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Gd	Y
c	11.5787	9.27013	10.4078	8.56968	6.46918	6.46966	1.19625
d	-0.160826	-0.16256	-0.297833	-0.242792	-0.235354	-0.300861	-0.191434
相关系数	0.9978	0.9987	0.9970	0.9985	0.9991	0.9995	0.9992

曲线方程为 $C_m = cI_R + d$ (C_m 单位: mg/ml)

$$\text{相关系数} = \frac{\sum (C_m - \bar{C}_m)(I_R - \bar{I}_R)}{\sqrt{\sum (C_m - \bar{C}_m)^2 \sum (I_R - \bar{I}_R)^2}}$$

2.3 检出限

$$\text{检出限 } C_{PL} = \frac{3}{m} \sqrt{\frac{Rb}{Tb}}$$

m 为灵敏度 (CPS/浓度), Rb 为背景计数率 (CPS), Tb 为背景测量时间 (100s)。实际测定限按经验规律为检出限 3 倍。表 3 列出了此法的检出限及实际测定限。

2.4 七种稀土元素混合标准溶液的测定

我们配制了七组 La、Ce、Pr、Nd、Sm、Gd、Y 的混合标准溶液进行测定。测定结

表 3 检出限

元 素	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Gd	Y
检出限 (μg)	0.39	0.35	0.50	0.41	0.36	0.40	0.14
实际测定 限 (μg)	1.17	1.05	1.50	1.23	1.08	1.20	0.42

果计算采用了归一化处理, 见表 4。表 4 说明, 单一稀土元素在溶液中的浓度大于 200ppm 时, 实测值和标准值之间的误差小于 5%, 小于 200ppm 时, 误差较大一些。

2.5 稀土标准矿 B-K-3 和 B-K-4 的测定

我们用碱熔草酸盐沉淀, 将 B-K-3、B-K-4 稀土矿分离出稀土草酸盐, 经灼烧后用盐酸溶解成溶液。

表 4 混合标准溶液测定结果

组 元 素	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Gd	Y
标准值(ppm)	971.0	1119	785.0	1041	120.0	100.0	80.0
1 实测值(ppm)	960.8	1104	793.0	1043	113.0	107.9	94.0
误差 (%)	1.0	1.3	1.0	0.3	5.8	7.9	17.5
标准值(ppm)	582.4	671.2	471.0	624.6	80.0	120.0	108.0
2 实测值(ppm)	585.6	661.2	482.3	630.8	78.7	110.8	99.6
误差 (%)	0.6	1.4	2.5	1.0	1.6	7.7	7.8
标准值(ppm)	971.0	1119	785.0	1041	584.6	1448	795.0
3 实测值(ppm)	949.3	1108	818.5	1021	562.0	1478	805.1
误差 (%)	2.2	1.0	4.3	1.9	3.9	2.1	1.3
标准值(ppm)	485.4	559.5	392.5	520.5	592.3	724.0	397.5
4 实测值(ppm)	493.7	556.4	406.4	513.0	281.8	728.5	408.9
误差 (%)	1.7	0.6	3.5	1.4	3.6	0.6	2.9
标准值(ppm)	242.7	279.8	196.3	261.8	146.2	362.0	198.8
5 实测值(ppm)	245.3	278.4	194.2	261.6	134.8	360.1	213.1
误差 (%)	1.1	0.5	1.1	0.08	7.8	0.6	7.2
标准值(ppm)	108.0	87.4	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
6 实测值(ppm)	120.4	83.5	106.0	104.1	90.7	81.2	107.0
误差 (%)	12	4.5	6.0	4.1	9.3	19	7.0
标准值(ppm)	54.0	43.7	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
7 实测值(ppm)	63.7	38.4	57.3	55.5	43.2	32.7	56.9
误差 (%)	18	12	15	11	14	35	14

对该溶液进行测定, 结果用归一化运算 (已知稀土氧化物总量用重量法测得为 24.23%—B-K-3, 34.79%—B-K-4), 结果见表 5 及表 6. 结果表明, La、Ce、Pr、Nd、Sm, 用本法测得的结果同有色金属研究总院提供的数据基本一致. Gd、Y 因含量较低, 在检出限附近, 误差较大.

表 5 B-K-3 矿测定结果

成分	La ₂ O ₃	CeO ₂	Pr ₆ O ₁₁	Nd ₂ O ₃	Sm ₂ O ₃	Gd ₂ O ₃	Y ₂ O ₃
本法 (%)	5.08	11.95	1.45	5.23	0.33	0.03	0.17
有色院 (%)	5.01	11.21	1.48	5.17	0.35	0.08	0.07

表 6 B-K-4 矿测定结果

成分	La ₂ O ₃	CeO ₂	Pr ₆ O ₁₁	Nd ₂ O ₃	Sm ₂ O ₃	Gd ₂ O ₃	Y ₂ O ₃
本法 (%)	7.71	16.69	2.19	7.55	0.44	—	0.21
有色院 (%)	7.93	16.25	2.10	7.19	0.51	0.11	0.08

2.6 讨论

用四蜡脚滤纸片在 X 荧光光谱仪上测量液体样品, 具有滤纸片制作简单, 无需特殊工具, 制样精度好, 标准曲线线性优良, 试样和标样用量小, 方法简便等优点. 对于 La、Ce、Pr、Nd、Sm、Gd、Y 这七种元素, 其各自浓度大于 50ppm 时的定量分析, 该法不失为一种行之有效的较好方法.

参 考 文 献

- [1] 尤金·伯廷著, 高新华译, X射线光谱分析导论, 地质出版社, 北京, 1981, 339—341.
- [2] 刁桂年等, 冶金分析与测试 (冶金分析分册), 3 (1983), No.4, 224—226.
- [3] 王子尧等, 分析化学, 13 (1985), No.2, 105—108.
- [4] Murata, M. et al., X-ray Spectrometry, 11 (1982), No. 4, 159—163.
- [5] 武汉大学编, 稀土元素分析化学 (下), 科学出版社, 北京, 1983, 540—543.
- [6] 谢忠信等, X 射线光谱分析, 科学出版社, 北京, 1982, 297—298.

Determination of 7 Rare Earth Elements Simultaneously by X-Ray Fluorescence with an Improved Filter Paper Technique

Zhao Guiwen

(Department of Applied Chemistry)

Tang Yuqi Mao Zhenwei

(Central Laboratory of Structure and Element Analysis)

订证: 本期299页倒数第 9 行 $W = Z_1 I_1'$ 应改为 $W = Z_1 I_{11}$

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

(Quarterly)

Vol. 17 No. 3 Sum No.55 1987

Hefei, Anhui

The People's Republic of China

中国科学技术大学学报

(季刊)

第17卷 第3期 (总第55期)

编辑出版: 《中国科学技术大学学报》编辑部
(安徽省合肥市金寨路24号)

印刷: 中国科学技术大学印刷厂

国内总发行: 合肥市邮局

订购处: 全国各地邮局

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司
(中国国际书店, 北京2820信箱)

安徽省报刊登证: 055

1987年9月出版

邮政代号: 26—31

国外代号: Q 527