Плотность спектра первой зоны линейной цепочки связанных осцилляторов Часть I

И.Н. Мощенко

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Аннотация: Цель настоящей работы – оценка плотности электронного спектра объектов с дисперсионной связью, в частности жидкого гелия. Интерес к его электронным свойствам вызван обнаруженной сравнительно недавно динамической поляризацией в волне второго звука, что сделало актуальным исследование его зонной структуры. В работе исследуемые объекты вслед за Борном моделируются линейной цепочкой связанных осцилляторов. При этом дисперсионная связь рассматривается на основе квазиклассического приближения Лондона, учитывающего корреляции осциллирующих дипольных моментов атомов. Первая часть работы носит подготовительный характер. Приведен краткий обзор по новым данным о свойствах гелия II, сформулирована постановка задачи. На простых примерах (линейки двух и трех связанных осцилляторов) отработана методика исследования. Этот раздел имеет и самостоятельное значение для экспресс оценок плотности электронного спектра при дисперсионной связи, и выявления тенденций изменение параметров спектра с увеличением числа структурных единиц. Получено, в частности, что ширина зоны при этом растет, а удельная энергия связи немного падает.
Во второй части на базе разработанных методик исследована длинная цепочка связанных осцилляторов. Рассчитана плотность электронного спектра, как для конкретных цепочек, так и в термодинамическом пределе. Полученные в работе результате планируется в дальнейшем использовать для разработки моделей динамической поляризации в гелии II.
Ключевые слова: дисперсионные силы, гелий II, дипольный момент, гармонический осциллятор, связанные колебания, нормальная мода, электронный спектр, плотность, узкая зона, энергия связи.

Введение

Пожалуй, ни один объект так не востребован в квантовой механике для моделирования различных свойств, как гармонический осциллятор. Сама квантовая теория берет свое начало от знаменитой работы Макса Планка, в которой он вводит такое понятие, как квантовый осциллятор, и моделирует с его помощью равновесное излучение вещества [1]. Квантовая теория теплоемкости Эйнштейна опиралась на предположение, что атомы в кристаллической решетке ведут себя как гармонические осцилляторы, которые не взаимодействуют [2]. В модели Дебая при оценке вклада колебаний решетки в теплоемкость тоже рассматриваются атомы-осцилляторы, но уж упруго связанные друг с другом [2]. В динамической теории кристаллической решетки Борна-Кармана использована модель линейной цепочки связанных гармонических осцилляторов, взаимодействующих только с ближайшими соседями [3,4]. И этот ряд примеров не ограничивается прошлым веком, он продолжается и в нынешнем столетии [5,6].

Настоящая работа также выполнена в этом русле исследований. Нас интересует не только и не столько плотность спектра объекта, вынесенного в заголовок. Вслед за Борном мы используем линейную цепочку осцилляторов для моделирования жидких и твердых структур с дисперсионной связью между атомами. И цель нашей работы – оценка плотности электронного спектра первой зоны, сформированной за счет лондоновского взаимодействия. В частности, нас интересует электронный спектр жидкого и твердого гелия.

Электрические свойства гелия

Зонная теория твердых тел возникли в первой половине прошлого века, и прошла длинный путь развития до настоящего времени. За этот период разработано много методов исследования структуры зон, посчитано большое количество конкретных примеров. Но в литературе данных о структуры зон гелия нам не удалось найти. Основное внимание исследователей по этому объекту направлено на выявление электронного строения одиночного атома, но не их совокупности. Как нам кажется, связано это не со сложностью расчетов, а с невостребованностью таких данных. Атом гелия содержит два электрона в полностью заполненной оболочке, в жидкости и твердом теле они формируют узкую заполненную зону. Материал является неполярным диэлектриком и его электрические свойства особых вопросов не вызывали.

Но ситуация изменилась в 2004 г. Когда появилось сообщение харьковских исследователей (А.С. Рыбалко) о динамической поляризации гелия II [7]. Было обнаружено, что в стоячей волне второго звука наблюдается переменная поляризация, направленная вдоль линии противотоковых течений нормальной и сверхтекучей компонент. Волна возбуждалась термическим способом и первопричиной поляризации может быть либо температурные осцилляции, либо вышеуказанные противотоковые течения. Примерно через полгода появилось новое сообщение этих исследователей. Ими была выявлена динамическая поляризация при других условиях, в торсионом осцилляторе [8]. При тангенциальных колебаниях устройства наблюдалась односторонне модулированная поляризация в гелии II, направленная вдоль радиуса. Здесь уже не было термических пульсаций, нормальная составляющая увлекалась стенками и совершала тангенциальные колебания, а сверхтекучая оставалась неподвижной. На основании чего многими исследователями динамической поляризации (в том числе и авторами открытия) был сделан вывод, что она обусловлена относительным движением обеих компонент.

На наш взгляд такая интерпретация только запутала общую картину явления. Нами был проведен анализ возможности возникновения противотоковых течений при вращении гелия II [9,10]. Получено, что за счет центробежной силы, действующей на нормальную составляющую, возможно развитие неустойчивости и возникновения пульсирующего течения, направленного вдоль радиуса к стенке [11]. При этом поток нормальной массы будет компенсироваться противотоковым течением сверхтекучей составляющей, к центру осциллятора. Такое поведение объясняет наблюдаемые при эксперименте закономерности (однонаправленная модуляция поляризации, пропорциональность величины квадрату частоты) [8]. Следует отметить, что благодаря механокалорическому эффекту, при противотоковых течениях возникнет температурный радиальный градиент, от центра к стенкам осциллятора. Таким образом, из предложенной картины потоков в осцилляторе вытекает, что и в первом, и во втором экспериментах харьковчан были одни и те же условия для возникновения динамической поляризации: колеблющиеся температурные неоднородности и противотоковые течения вдоль их градиента. При этом поляризация возникает также вдоль градиента и потоков [11].

Обнаруженное новое явление, конечно, привлекло внимание теоретиков. На настоящий момент предложено около десятка моделей, пытающихся теоретически описать его. Неплохой обзор этих работ приведен в сравнительно свежей статье авторов открытия [12], где подведен на настоящий момент итог. Некоторые вопросы динамической поляризации прояснились, но полного понимания и адекватного теоретического описания ее пока нет. Необычность самого явления и отсутствия теории по этому поводу привело к тому, что возникли сомнения по поводу обнаружения самого эффекта. Но в 2016 другая группа исследователей (пражская), подтвердила наличие динамической поляризации на немного другой аппаратуре [12].

Таким образом, в настоящий момент в науке актуален вопрос о теоретическом описании эффекта динамической поляризации в гелии II. Одним из шагов к этому является исследование зонной структуры электронного спектра гелия, приведенное в настоящей работе.

Эта зона формируется под воздействием дисперсионных сил взаимодействия атомов, описанных впервые Лондоном в 30-х годах прошлого века [13]. Он обратил внимание, что в неполярных атомах дипольный момент отсутствует только в среднем. Электроны совершают движение вокруг заряженного ядра, в каждый фиксированный момент центры тяжести положительного и отрицательного зарядов не совпадают, и образуется осциллирующий мгновенный дипольный момент, Корреляции этих колебаний для соседних атомов и приводят к возникновению сил притяжения, называемых дисперсионными [13,14]. Для расчетов этих сил

Лондон использовал модель двух связанных линейных осцилляторов. Она широко распространенна и приводится практически в каждом учебнике по физике твердого тела [13,14]. Но для наших вычислений понадобятся некоторые ее результаты, и для лучшего понимания работы приведем основные положения модели. При этом мы будем придерживаться работ [13] и [14].

Модель Лондона дисперсионных сил

В свободных атомах дипольные моменты отсутствуют, центры отрицательных и положительных зарядов совпадают. При наложении электрического поля в них индуцируется дипольный момент

$$d = Ze\, x = \alpha E, \tag{1}$$

здесь Ze – величина заряда, x – смещение центра отрицательного заряда (здесь и далее мы используем адиабатическое приближение, считая, что положительные заряды неподвижны), α – поляризуемость, E – напряженность поля.

Действующая при этом на заряд электрическая сила уравновешивается обобщенной квазиупругой возвращающей силой (F_{yn}=-kx, k – коэффициент связи)

$$F_{\text{уп}} = -kx = -Ze\, E. \tag{2}$$

Следует отметить, что реально картина конечно гораздо сложнее. При включении электрического поля деформируется волновая функция электронов, центр тяжести заряда смещается, плотность распределения дипольного момента изменяется, появляется средний момент d. Формула (1) как раз связывает этот усредненный момент с напряженностью поля. Причем поляризуемость обычно определяется из экспериментов. Обобщенная возвращающая сила F_{yn} - это результирующая электрических сил, действующих со стороны положительного заряда на электронное облако. В первом приближении ее можно считать пропорциональной величине смещения центра отрицательного заряда. Коэффициент пропорциональности при этом по (1) и (2) можно связать с измеряемыми величинами.

$$k = \frac{(Ze)^2}{\propto}. \tag{3}$$

Как мы отмечали, мгновенные дипольные моменты в атоме осциллируют с большой частотой. Самая простая модель, отражающая только эту сторону реальной картины, может быть разработана на базе такой введенной возвращающей силы. Одномерные колебания точечного отрицательного заряда в поле этих сил. Полная энергия такой системы

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{kx^2}{2}, \tag{4}$$

где m – масса отрицательного заряда.

Частота колебаний такой системы определяется его массой m и коэффициентом связи

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{(Ze)^2}{\alpha m}}. \tag{5}$$

Для перехода от классического рассмотрения к квантовой механике, нужно потенциальную энергию системы подставить в уравнение Шредингера. При этом получиться стандартный одномерный квантовый осциллятор.

Существенно, что вследствие квантовой природы основное состояние его представляет собой нулевые колебания с частотой ν_0, постоянно осциллирующим электрическим дипольным моментом и нулевой энергией $E_0 = \frac{1}{2}h\nu_0$ (h – постоянная Планка). Собственно говоря, корреляция нулевых колебаний соседних атомов и приводит к дисперсионным силам.

Оценку энергии связи для них дает уже модель с двумя линейными связанными осцилляторами. Полная энергия такой системы равна сумме энергий свободных осцилляторов плюс энергия их электростатического взаимодействия

$$E = E_1 + E_2 + E_{\text{вз}}, \tag{6}$$

$$E_i = \frac{p_i}{2m} + \frac{k x_i^2}{2} \qquad (i=1,2), \tag{7}$$

$$E_{вз} = -\frac{(Ze)^2 x_1 x_2}{2\pi\varepsilon_0 r^3}, \tag{8}$$

здесь p_i – импульс соответствующего заряда, r – расстояние между положительными зарядами, ε_0 – диэлектрическая постоянная. Отрицательные заряды отклоняются вдоль линии, соединяющей центры осцилляторов, при этом положительные направления их смещений x_1 и x_2 выбраны в одну сторону. Отметим, что в [14] схема модели не приведена и положительные направления не оговорены. Но судя по рассчитанной там энергии взаимодействия, положительные направления смешений зарядов в первом и втором осцилляторах выбраны в противоположных направлениях. Мы посчитали более логичным выбрать в одном направлении, как в [13] (см. там Рис. 2.2). Это привело к тому, что энергия взаимодействия у нас противоположного знака по сравнению с [14].

Для выяснения поведения осцилляторов при учете взаимодействия перейдем к нормальным координатам

$$x_s = \frac{x_1 + x_1}{\sqrt{2}}, \qquad x_a = \frac{x_1 - x_1}{\sqrt{2}} \; . \tag{9}$$

Энергия в этих переменных является суммой двух энергий, аналогичных (4), только с другими коэффициентами связи.

$$E = \left(\frac{m\dot{x}_s^2}{2} + \left(k - \frac{(Ze)^2}{2\pi\varepsilon_0 r^3}\right)\frac{x_s^2}{2}\right) + \left(\frac{m\dot{x}_a^2}{2} + \left(k + \frac{(Ze)^2}{2\pi\varepsilon_0 r^3}\right)\frac{x_a^2}{2}\right). \tag{10}$$

Она описывает два независимых осциллятора с собственными частотами

$$\nu_a, \nu_s = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}\left(1 \pm \frac{(Ze)^2}{2\pi k\,\varepsilon_0 r^3}\right)} = \nu_0\sqrt{\left(1 \pm \frac{\alpha}{2\pi k\,\varepsilon_0 r^3}\right)}, \tag{11}$$

где нижняя частота υ_s соответствует симметричной моде, в которой оба заряда колеблются в фазе, а верхняя υ_a – антисимметричным противофазным колебаниям. Одновременное наложение этих мод описывает периодическую перекачку энергии от одного резонатора к другому. Переходя от классического описания к квантовой механике, получим суммарную нулевую энергию двух взаимодействующих квантовых осцилляторов

$$E = \frac{h\nu_s}{2} + \frac{h\nu_a}{2} = \frac{h\nu_0}{2}\left(\sqrt{\left(1 - \frac{\alpha}{2\pi\varepsilon_0 r^3}\right)} + \sqrt{\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi\varepsilon_0 r^3}\right)}\right). \quad (12)$$

Разлагая подкоренные выражения в ряд по малому параметру $\frac{\alpha}{2\pi k\,\varepsilon_0 r^3}$, и оставляя первое слагаемое, упростим выражение для нулевой энергии системы

$$E = h\nu_0\left(1 - \frac{\alpha^2}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2 r^6} + \cdots\right). \quad (13)$$

Отсюда легко получается Лондоновская оценка энергии связи двух атомов для дисперсионного взаимодействии [13,14]

$$\Delta E_{\text{св}} \approx h\nu_0\,\frac{\alpha^2}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2 r^6}\,. \quad (14)$$

Линейная цепочка трех связанных осцилляторов

Теперь рассмотрим линейную цепочку из трех осцилляторов, расположенных на одинаковом расстоянии *r*. Энергия взаимодействия двух осцилляторов быстро убывает с расстоянием, обратно пропорционально третей степени. Поэтому вполне допустимо ограничиться взаимодействием только ближайших соседей. Полная энергия системы при этом будет равна

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + E_{12} + E_{23}, \quad (15)$$

здесь энергия каждого осциллятора E_i аналогична (4), а интерференционные слагаемые E_{ij} – приведенному в (8).

Для нахождения частот такой системы не обязательно переходить к нормальным координатам. Достаточно воспользоваться теоремой об одновременной диагонализации двух квадратичных форм [15]. Пусть у нас кинетическую и потенциальную энергию можно представить в виде квадратичных форм:

$$T = \frac{1}{2}\sum a_{ij}\,\dot{x}_i\,\dot{x}_j,\;\; U = \frac{1}{2}\sum b_{ij}\,x_i x_j \quad (\mathrm{i,j}=1,2,\ldots,\mathrm{n}), \quad (16)$$

Тогда переходя к нормальным координатам их можно привести к диагональному виду [15]

$$T = \frac{1}{2}\sum \dot{X}_k^{\ 2},\ U = \frac{1}{2}\sum \lambda_k X_k \quad (k=1,2, \ldots,n), \qquad (17)$$

Самое существенное, что коэффициенты потенциальной энергии λ_k являются корнями уравнения [15,16]

$$\det(\|a_{ij}\| - \lambda\|b_{ij}\|) = 0, \qquad (18)$$

здесь мы использовали общепринятые обозначения, *det ()* – определитель матрицы, стоящей в скобках, $\|\ \|$ - матрица из соответствующих коэффициентов.

При этом уравнения движения в форме Лагранжа распадаются на n независимых уравнений [15]

$$\dot{X}_r = -\lambda_r X_r, \qquad (19)$$

каждое из которых описывает нормальное колебания с частотой ν_r, определяемой коэффициентом λ_r следующим образом

$$\lambda_r = 4\pi^2 \nu_r^{\ 2}, \qquad (20)$$

В квантомеханическом рассмотрении потенциальная энергия (17) описывает набор нулевых колебаний независимых квантовых осцилляторов с частотой (20).

Для рассматриваемого случая уравнение (18) переходит в

$$\begin{vmatrix} a & b & 0 \\ b & a & b \\ 0 & b & a \end{vmatrix} = 0, \qquad (21)$$

где введены следующие величины

$$a = k - \lambda m,\ b = -\frac{(Ze)^2}{2\pi\varepsilon_0 r^3}. \qquad (22)$$

Решив это уравнение, получим три корня для λ

$$\lambda_1 = \frac{k}{m}\left(1 + \sqrt{2}\frac{b}{k}\right),\ \ \lambda_2 = \frac{k}{m},\ \ \lambda_3 = \frac{k}{m}\left(1 - \sqrt{2}\frac{b}{k}\right). \qquad (23)$$

И соответственно три частоты нормальных колебаний

$$\nu_1 = \nu_0\sqrt{1-\sqrt{2}\frac{(Ze)^2}{2\pi k\,\varepsilon_0 r^3}}, \nu_2 = \nu_0, \nu_3 = \nu_0\sqrt{1+\sqrt{2}\frac{(Ze)^2}{2\pi k\,\varepsilon_0 r^3}}\ , \tag{24}$$

на которые распадается основная частота за счет взаимодействия осцилляторов, что и решает задачу о спектре рассматриваемой системы.

Продолжение работы опубликовано под тем же названием в следующем выпуске журнала «Инженерный вестник Дона» № 6, 2019 г.

Литература

1. Клейн М.Дж. Макс Планк и начало квантовой теории. УФН. Т. 92, № 4. 1967. С. 679-700.

2. Савельев И.В. Курс общей физики: Учеб. пособие. В 3-х т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. М.; Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. 320 с.

3. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1958. 490 с.

4. Born,M., Huang K. Dynamical theory of crystal lattices. Oxford : Clarendon Press, 1954. 420 p.

5. Forda G. W. , O'Connellb R. F. Entropy of a Quantum Oscillator coupled to a Heat Bath and implications for Quantum Thermodynamics. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. V. 29, No 1–2. October 2005. P. 82-86.

6. Гиляров В.Л., Слуцкер А.И. Анализ энергетики нагружаемого квантового ангармонического осциллятора в широкой области температур. Журнал технической физики.Т. 80, № 5. 2010. С. 94-99.

7. Рыбалко А.С., Наблюдение электрической индукции, обусловленной волной второго звука в He II. Физика низких температур, 2004, т. 30, № 12, с. 1321–1325.

8. Рыбалко А.С., Рубец С.П. Наблюдение механоэлектрического эффекта в He II. Физика низких температур, 2005, т. 31, № 7, с. 820–825.

9. Мощенко И.Н., Яценко В.К., Бугаян И.Ф., Пирогов Е. В. Противотоковые течения во вращающемся гелии II. Инженерный вестник Дона, 2018, №2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/5151.

10. Мощенко И.Н., Яценко В.К., Ярошенко А. Н. Новый тип безвихревых течений гелия II во вращающемся цилиндре. Инженерный вестник Дона, 2018, №3 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2018/5157.

11. Мощенко И.Н., Бугаян И.Ф. Некоторые вопросы динамической поляризации гелия II. Сборник трудов Ростовского отделения Российской инженерной академии, 2018 г. ISBN 978-5-6040259-9-4. URL: rozmisly.ru/preprints/86. (Дата обращения 01.07.2019).

12. Рыбалко А.С., Чаговец Т.В., Королев А.М. Электрический отклик в волне второго звука: аппаратурный аспект. Физика низких температур, 2016, т. 43, № 6, с. 927–938.

13. Епифанов Г.И. Физика твердого тела. М. Высшая школа. 1965. 276 с.

14. Жданов Г.С., Хунджуа А.Г. Лекции по физике твердого тела: Принципы строения, реальная структура, фазовые превращения. М. Изд-во МГУ. 1988 231 с.

15. Bhagavantam S. and Venkatarayudu T. Theory of groups and its application to physical problems. Academic Press, 2016. 280 p.

References

1. Klejn M.Dzh. Maks Plank i nachalo kvantovoj teorii. UFN. V. 92, No 4. 1967. P. 679-700.

2. Savel`ev I.V. Kurs obshhej fiziki: Ucheb. posobie. V 3-x t. T. 3. Kvantovaya optika. Atomnaya fizika. Fizika tverdogo tela. Fizika atomnogo yadra i e`lementarny`x chasticz [General physics course: Studies. benefit. In 3 t. T. 3.

Quantum optics. Atomic physics. Solid state physics. Physics of atomic nucleus and elementary particles]. M.; Nauka, Gl. red. fiz.-mat. lit., 1987. 320 p.

3. Born M., Kun` X. Dinamicheskaya teoriya kristallicheskix reshetok [Dynamic theory of crystal lattices]. M.: Izd-vo inostr. lit-ry`, 1958. 490 p.

4. Born,M., Huang K. Dynamical theory of crystal lattices. Oxford : Clarendon Press, 1954. 420 p.

5. Forda G. W. , O'Connellb R. F. Entropy of a Quantum Oscillator coupled to a Heat Bath and implications for Quantum Thermodynamics. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. V. 29, No 1–2. October 2005. P. 82-86.

6. Gilyarov V.L., Sluczker A.I. Zhurnal texnicheskoj fiziki.V. 80, No 5. 2010. P. 94-99.

7. Ry`balko A.S. Fizika nizkix temperatur, 2004. V. 30, No 12. P. 1321–1325.

8. Ry`balko A.S., Rubecz S.P. Fizika nizkix temperatur, 2005. V. 31, No 7. P. 820–825.

9. Moschenko I.N., Yatsenko V.K., Bugayan I.F., Pirogov E.V. Inzhenerny`j vestnik Dona, 2018, No 2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/5151.

10. Moschenko I.N., Yatsenko V.K., Yaroshenko A.N. Inzhenerny`j vestnik Dona, 2018, No 3 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2018/5157.

11. Moschenko I.N., Sbornik trudov Rostovskogo otdeleniya Rossijskoj inzhenernoj akademii, 2018 y. ISBN 978-5-6040259-9-4. URL: rozmisly.ru/preprints/86. (Date accessed 01.07.2019).

12. Ry`balko A.S., Chagovecz T.V. Fizika nizkix temperatur, 2016, V. 43, No 6. P. 927–938.

13. Epifanov G.I. Fizika tverdogo tela [Solid state physics]. M. Vy`sshaya shkola. 1965. 276 p.

14. Zhdanov G.S., Xundzhua A.G. Lekcii po fizike tverdogo tela: Principy` stroeniya, real`naya struktura, fazovy`e prevrashheniya [Lectures on

solid state physics: principles of structure, real structure, phase transformations]. M. Izd-vo MGU. 1988 231 p.

15. Bhagavantam S. and Venkatarayudu T. Theory of groups and its application to physical problems. Academic Press, 2016. 280 p.