Инженерный вестник Дона, №6 (2019)
ivdon.ru/ru/magazine/archive/n6y2019/6076

Плотность спектра первой зоны линейной цепочки связанных осцилляторов Часть II

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 выявленным сравнительно недавно новым свойством гелия II – динамической поляризацией в волне второго звука. 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.
Ключевые слова: дисперсионные силы, гелий II, дипольный момент, гармонический осциллятор, связанные колебания, нормальная мода, электронный спектр, плотность, узкая зона, энергия связи.

Продолжение. Начало работы опубликовано под тем же названием в предыдущем выпуске журнала «Инженерный вестник Дона» № 5, 2019 г.

Плотность спектра длинной линейной цепочки связанных осцилляторов

В предыдущем разделе мы на небольших объектах отработали методы оценки плотности спектра взаимодействующих осцилляторов. Теперь рассмотрим линейную цепочку с n (n>3) такими объектами. Энергию взаимодействия осцилляторов по вышеуказанной причине будем рассматривать только для ближайших соседей. Полная энергия такой системы будет аналогична рассмотренной в предыдущем случае (см. (13)), только, конечно, с гораздо большим числом слагаемых. Будет ровно *n* слагаемых типа (4), соответствующих отдельным резонаторам и *(n-1)*членов, аналогичных (8), описывающих взаимодействие осцилляторов. Уравнение (18), задающее частоты, также будет аналогично (21), только, конечно, с определителем n-го порядка

$$\begin{vmatrix} a\ b\ 0\ 0 \dots 0\ 0 \\ b\ a\ b\ 0 \dots 0\ 0 \\ 0\ b\ a\ b \dots 0\ 0 \\ . \qquad \dots 0\ 0 \\ . \qquad \dots 0\ 0 \\ . \qquad \dots 0\ 0 \\ 0\ 0\ 0\ .\ b\ a\ b\ 0 \\ 0\ 0\ 0..0\ b\ a\ b \\ 0\ 0\ 0 \dots 0\ b\ a \end{vmatrix}_{n\times n} = 0. \qquad (25)$$

Под знаком определителя в (25) стоит трехдиагональная матрица Якоби. Для них разработаны специальные методы расчета определителей, основанные на рекуррентных соотношениях [16]. Разложим определитель вида (25) по последней строке, а в получившейся сумме определитель при коэффициенте *b* еще раз разложим таким же образом. В итоге получим хорошо известное рекуррентное соотношение

$$\Delta_n = a\Delta_{\mathrm{n}-1} - \mathrm{b}^2\Delta_{\mathrm{n}-2}\ , \qquad (26)$$

здесь Δ_i обозначает определитель типа (25) i-го порядка. Начинается ряд таких величин с $\Delta_1 = a$. Здесь следует отметить, что из вида (26) и из того, что Δ_1 пропорционален *a,* последовательной подстановкой можно получить, что такая же пропорциональность справедлива для произвольного нечетного порядка.

Следующий член рассматриваемого ряда $\Delta_2 = a^2 - b^2$. Для определителя третьего порядка получим

$$\Delta_3 = a\Delta_2 - \mathrm{b}^2\Delta_1 = \mathrm{a}(\mathrm{a}^2 - \mathrm{b}^2) - \mathrm{b}^2\mathrm{a} = \mathrm{a}(\mathrm{a}^2 - 2). \qquad (27)$$

В принципе этот ряд можно прогнать до любого порядка, и это легче, чем считать большие определители. Но существуют еще более простые методы, заключающиеся в прямом решении соотношения (26) [16].

Для любых конкретных значений a и b рассмотренный набор определителей представляет собой численный ряд, для которого выполняется закономерность (26), являющаяся в данном случае линейным разностным уравнением второго порядка. Для его решения формально заменим в (26) определители степенными переменными того же порядка и сократим до минимальной степени. Получим характеристическое уравнение

$$y^2 - ay + b^2 = 0,$$

(28)

корни которого y_1, y_2 определяют численные значения рассматриваемых определителей, по-разному, в зависимости от того равны эти корни или нет. При $y_1 = y_2 = (a/2)$ определитель типа (25) равен [16]

$$\Delta_n = (\mathrm{C}_1 + \mathrm{C}_2 \mathrm{n}) \mathrm{y}_1{}^{\mathrm{n}}. \quad (29)$$

Эта формула справедлива для любого n, и постоянные C_1 и C_2 вычислим по начальным членам ряда определителей

$$\Delta_1 = a, \quad (30)$$

$$\Delta_2 = a^2 - b^2. \quad (31)$$

В результате получим

$$\Delta_n = (1 + \mathrm{n}) \frac{\mathrm{a}^{\mathrm{n}}}{2^{\mathrm{n}}}, \quad (30)$$

здесь мы учли, что $y_1 = (a/2)$, а также что $y_1 = y_2$ выполняется только при условии $(\frac{a^2}{4} - b^2 = 0)$.

Для нахождения частот нормальных колебаний найденный определитель нужно приравнять нулю (см. 25). Отсюда получим

$$a = (k - \lambda m) = 0; \ \lambda = \frac{k}{m}\ ; \ \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \nu_0\ . \quad (31)$$

Так как при этом b также равно нулю $(b^2=(a/2)^2)$, то из этого следует, что характеристическое уравнение с равными корнями соответствует тривиальной ситуации, цепочке одинаковых не связанных осцилляторов. Такая модель описывает набор отдельных невзаимодействующих атомов и интереса не представляет.

Теперь рассмотрим ситуацию, когда детерминант характеристического уравнения (28) не равен нулю ($D=a^2$-$4b^2 \neq 0$) и оно имеет разные корни y_1 и y_2

$$y_{1,2} = \frac{a}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a^2 - 4b^{\,2})}. \tag{32}$$

Тогда решение разностного уравнения (26) имеет вид

$$\Delta_n = (C_3 y_1{}^n + C_4 y_2{}^n). \tag{33}$$

Как и в предыдущем случае, это выражение справедливо для определителей любых порядков, что позволяет определить постоянные C_3 и C_4 по (30, 31). При этом константы будут выражены через a, b и y_1, y_2. Последние, будучи решениями (28), по теореме Виета удовлетворяют соотношениям

$$y_1 + y_2 = a, \tag{34}$$

$$y_1 y_2 = b^2. \tag{35}$$

Используя два последних уравнения, избавимся в C_3 и C_4 от a и b, подставим эти константы в (33), приводя его к окончательному виду

$$\Delta_n = \frac{y_1{}^{n+1} - y_2{}^{n+1}}{y_1 - y_2}. \tag{36}$$

Далее приравняем найденный определитель к нулю

$$\frac{y_1{}^{n+1} - y_2{}^{n+1}}{y_1 - y_2} = 0\,. \tag{37}$$

Это соотношение совместно с (34, 35) полностью определяют спектр рассматриваемой линейной цепочки.

Решения такой системы уравнений немного отличаются для четных и нечетных n (напомним, n – число линейных осцилляторов в рассматриваемой цепочке).

Для четного количества осцилляторов уравнению (37) удовлетворяют корни

$$y_1 = C_5 K_j; \quad y_2 = C_5 K_p \,, \tag{38}$$

здесь C_5 – действительная константа, а $K_{j,\ m}$ произвольные комплексные корни степени $(n+1)$ из единицы.

$$K_j = \cos(\frac{2\pi}{n+1} j) + i\ \sin(\frac{2\pi}{n+1} j)\,, \mathrm{j} = 0 \ldots (\mathrm{n}+1)\,, \tag{39}$$

где i – мнимая единица.

Подставляя (38) в (35), мы ограничим число корней

$$y_1 = \pm b K_j\,; \quad y_2 = \pm b\ K^*_j\ ;\ j \neq 0,\ (n+1)\,, \tag{40}$$

здесь символ * означает комплексное сопряжение, последнее неравенство вытекает из того, что у нас из $y_1 \neq y_2$.

И наконец, подставляя в свою очередь полученное в (34), придем к уравнению, позволяющему напрямую рассчитать спектр колебаний рассматриваемой системы осцилляторов

$$a = \pm b \cos(\frac{2\pi}{n+1} j), \mathrm{j} = 1 \ldots (\mathrm{n}/2)\,, \tag{41}$$

здесь учтена четность косинуса, приводящая к сворачиванию ряда по j наполовину.

Напомним, у нас коэффициент взаимосвязи b зависит от параметров системы

$$b = -\frac{(Ze)^2}{2\pi\varepsilon_0 r^3}, \tag{42}$$

здесь Ze - заряд одного из плеч дипольного осциллятора, r - расстояние между осцилляторами в цепочке, ε_0 – диэлектрическая постоянная.

Коэффициент a определяется еще и частотой колебаний v

$$a = k - \lambda m, \quad \lambda = 4\pi^2 v^2\,, \tag{43}$$

где k – упругая возвращающая сила одиночного осциллятора, ее можно выразить через заряд электронов рассматриваемой оболочки атома Ze и его поляризуемость α (см. в первой части (3) - $k = \frac{(Ze)^2}{\propto}$.) , m – его масса.

Из (43) найдем искомый частотный спектр

$$v_j = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m} \pm \frac{b}{m}\cos(\frac{2\pi}{n+1} j)} = v_0\sqrt{1 \pm \frac{b}{k}\cos(\frac{2\pi}{n+1} j)}, \ \ \mathrm{j} = 1 \ldots (\mathrm{n}/2)\,. \tag{44}$$

Переходя от классического описания рассматриваемой системы к квантовому, получим энергетический спектр

$$E_j = E_0\sqrt{1 \pm \frac{b}{k}\cos(\frac{2\pi}{n+1}j)},\ \ \mathrm{j} = 1 \dots (\mathrm{n}/2)\ , \qquad (45)$$

где E_0 – энергия нулевых колебаний отдельного осциллятора.

Мы видим, что весь спектр цепочки линейных связанных осцилляторов состоит из двух ветвей. Одна соответствует знаку плюс в (45) и расположена ниже энергии нулевых колебаний, вторая (выше E_0) – минусу.

Следует отметить, что полученное выражение можно переписать и в другом виде, не с параллельными ветвями со знаками «-» и «+», а последовательном

$$E_j = E_0\sqrt{1 + \frac{b}{k}\cos(\frac{\pi}{n+1}j)},\ \ \mathrm{j} = 1 \dots n\ . \qquad (46)$$

В случае нечетного числа осцилляторов расчеты проводят немного по-другому, но в конечном итоге приходят к тем же формулам (44 или 45) для описания спектра. И здесь приводить эти выкладки мы не будем.

В термодинамическом пределе ($n \to \infty$) полученный спектр из дискретного становятся сплошным, зависящим от одного параметра φ

$$E(\varphi) = E_0\sqrt{1 + \frac{b}{k}\cos(\varphi)} = E_0\sqrt{1 - \frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}\cos(\varphi)}\ \ 0 < \varphi < \pi. \qquad (47)$$

Таким образом, мы получили, что для цепочки линейных связанных осцилляторов энергетический спектр простирается от $E_{\text{нижн}} = \frac{h\nu_0}{2}\sqrt{1 - \frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}}$ до $E_{\text{верхн}} = \frac{h\nu_0}{2}\sqrt{1 + \frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}}$. Ширина спектра будет

$$\Delta E = \frac{h\nu_0}{2}\left(\sqrt{1 + \frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}} - \sqrt{1 - \frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}}\right) \approx \frac{h\nu_0}{2}\frac{\propto}{2\pi\varepsilon_0 r^3}. \qquad (47)$$

Среднее значение энергии, приходящейся на одни осциллятор соответственно равно

$$E_{\text{сред}} = \frac{h\nu_0}{2\pi}\int_0^{\pi}\sqrt{1-\frac{\propto\cos(\varphi)}{2\pi\varepsilon_0 r^3}}d\varphi \approx \frac{h\nu_0}{\pi}(1-\frac{\propto^2}{64\pi\varepsilon_0{}^2 r^6}). \quad (48)$$

Откуда получается, что средняя энергия связи, опять же на один осциллятор, будет

$$\Delta E_{\text{св}} \approx h\nu_0\,\frac{\alpha^2}{64\pi^2\varepsilon_0{}^2 r^6}. \quad (49)$$

В первой части этой работы мы привели Лондоновскую [13,14] энергию связи двух атомов для дисперсионного взаимодействии (см. (14)). Полученная нами средняя энергия связи на один атом в цепочке линейных осцилляторов ровно в два раза меньше, т.е. полностью совпадает с оценкой Лондона, определенной на модели из двух связанных осцилляторов. Следует отметить, что если в цепочке осцилляторов увеличивать число последних, то энергия связи на один осциллятор вначале увеличивается (начиная со значения, описываемого (49)), потом начинает уменьшается, и в термодинамическом пределе опять стремится к (49).

Основным результатом работы является, конечно, не уточнение оценок Лондона на более сложной и адекватной модели – системе из большого числа осцилляторов, связанных в линейную цепочку. Пожалуй, главное достижение в настоящей работе – полученная функция распределения энергетического спектра (47). В дальнейшем предполагается ее использовать при разработке модели динамической поляризации (см. 7, 8) в гелии II.

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.

16. Ильин В.П., Кузнецов Ю.И. Трехдиагональные матрицы и их приложения. М.: Наука, ГРФМЛ, 1985, 208с.

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.

16. Il`in V.P., Kuzneczov Yu.I. Trexdiagonal`ny`e matricy i ix prilozheniya [Three diagonal matrices and their applications]. M.: Nauka, GRFML, 1985, 208 p.