УДК 538.95

Спектральные свойства квантового ангармонического осциллятора, находящегося под действием постоянной силы

© О.С. Еркович, А.А. Ведерников

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Показано, что действие постоянной силы F на квантовый ангармонический осциллятор приводит к нелинейному по F сдвигу всех энергетических уровней. Исследован спектр энергии нагруженного ангармонического осциллятора. Установлено, что при малых нагрузках можно ограничиться линейным приближением для сдвига уровней энергии. Полученные результаты могут быть использованы при описании термодинамических характеристик макро- и мезоскопических твердых тел, а также твердотельных наночастиц.

Ключевые слова: *энергетический спектр, квантовый ангармонический осциллятор, теория возмущений, потенциал Леннарда – Джонса.*

Введение. Простейшей моделью твердого тела является совокупность осцилляторов как элементов динамической системы [1, 2]. Термические и упругие свойства твердых тел в значительной степени определяются параметрами отдельного осциллятора. Ангармоничность межатомного взаимодействия приводит к появлению ряда эффектов, отсутствующих в системе гармонических осцилляторов. В частности, адиабатическое упругое нагружение приводит к изменению температуры твердого тела (термоупругий эффект) [3]. Теория термоупругости позволяет описать системы, работающие в условиях неравномерного нестационарного нагрева, при котором изменяются физико-механические свойства материалов и возникают градиенты температуры, сопровождающиеся неодинаковым тепловым расширением частей элементов. Неравномерное тепловое расширение в сплошном теле в общем случае приводит к образованию температурных напряжений. Для исследования прочности систем необходимо знать значения и характер действия температурных напряжений. Следует отметить, что при описании термоупругости используются термодинамические методы, в рамках которых микроскопическая природа рассматриваемых эффектов не учитывается, что допустимо при решении макроскопических задач теории термоупругости. В настоящее время задачи термоупругости возникают при описании динамических систем, размеры которых могут существенно повлиять на характер наблюдаемых эффектов. В этом случае следует рассмотреть возможность описания таких систем методами статистической физики. Для этого необходимо исследовать вопрос об изменении энергетического спектра отдельного ангармонического осциллятора, находящегося под действием постоянной внешней силы, и получить выражения для термодинамических функций, описывающих систему ангармонических нагруженных осцилляторов.

В настоящее время имеется достаточно много работ по исследованию собственных функций и собственных значений квантовых ангармонических осцилляторов с потенциалами различного порядка ангармонизма [4–7], а также по исследованию резонансных явлений при действии на нелинейный квантовый осциллятор периодической внешней силы [8, 9].

Однако работы, посвященные изменению спектра квантового ангармонического осциллятора, находящегося под действием постоянной внешней силы, практически отсутствуют. Единственным исключением является работа [10] по исследованию спектра нагруженного квантового ангармонического осциллятора при предположении, что потенциальная энергия может быть описана кубическим двучленом, без обсуждения границ применимости предлагаемой модели.

Постановка задачи. Целью данной работы является исследование энергетических свойств системы ангармонических осцилляторов, находящихся под действием постоянной внешней силы. Для решения поставленной задачи проведено предварительное исследование характера межатомного ангармонизма, а также возможности использования линейного приближения для сдвига энергетических уровней гамильтониана под внешним воздействием.

Возможность использования модели ангармонического осциллятора. Потенциальную энергию межатомного взаимодействия можно описать суперпозицией двух функций, одна из которых описывает притяжение между атомами, обусловленное взаимной поляризацией их электронных оболочек, вторая – отталкивание, обусловленное перекрыванием электронных оболочек атомов.

В качестве наиболее известного примера можно привести потенциал Леннарда – Джонса [11]:

$$\varphi(r) = \varphi_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right],$$

где r – расстояние между соседними атомами.

Минимум потенциала Леннарда – Джонса соответствует равновесному расстоянию $r_0 = \sigma$ между соседними атомами. Разложив потенциал в ряд Тейлора вблизи точки минимума r_0, получим

$$\varphi(r) = -\varphi_0 + c_2\left(r - r_0\right)^2 + c_3\left(r - r_0\right)^3 + \ldots\quad ,$$

где $c_2 = \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)\Bigg|_{r=r_0} = 36\frac{\varphi_0}{\sigma^2}$; $c_3 = \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3\varphi}{\partial r^3}\right)\Bigg|_{r=r_0} = -252\frac{\varphi_0}{\sigma^3}$.

Таким образом, для описания узлов кристаллической решетки твердого тела можно использовать модель ангармонического осциллятора.

Величина φ_0 имеет смысл энергии сцепления, приходящейся на кристаллическую ячейку (отнесенную к одному атому). Энергия сцепления определяется разностью между энергией свободных атомов и энергией кристалла. Если пренебречь кинетической энергией атомов, энергия сцепления определяется суммой потенциалов Леннарда – Джонса, причем суммирование осуществляется по всем парам атомов в кристалле.

Поскольку потенциальная энергия взаимодействия не близка к нулю только для ближайших атомов, то такая сумма сводится к потенциалу Леннарда – Джонса, умноженному на число атомов, которые располагаются в непосредственной близости, и на число N атомов в кристаллической решетке.

Потенциал иона кристаллической решетки можно аппроксимировать потенциалом ангармонического осциллятора:

$$U(r) = -\varphi_0 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{3}\beta x^3\,, \qquad (1)$$

где m – масса частицы; $\omega = \sqrt{\frac{72\varphi_0}{m\sigma^2}}$ – собственная частота колебаний осциллятора; $\beta = \frac{756\varphi_0}{\sigma^3}$ – коэффициент ангармоничности; x – смещение частицы относительно положения равновесия.

Для того чтобы выявить изменение энергетического спектра и функции распределения $\left|\psi(x)\right|^2$ при действии постоянной внешней силы, целесообразно включить потенциал

$$V\left(x\right) = -Fx,$$

описывающий внешнее воздействие, в невозмущенный гамильтониан, а ангармоническую поправку рассматривать как возмущение.

Сдвиг энергетического спектра при действии внешней силы без учета ангармоничности. При отсутствии ангармонизма стационарное уравнение Шрёдингера будет иметь вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U^{(0)}(x)\right]\psi(x)=E\psi(x), \tag{2}$$

где внешнее воздействие, описываемое слагаемым $-Fx$, включено в невозмущенный гамильтониан:

$$U^{(0)}\left(x\right)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2-Fx-U_0.$$

Для исследования спектральных свойств невозмущенного гамильтониана выполним следующие преобразования. Запишем потенциальную энергию нагруженного гармонического осциллятора в виде

$$U^{(0)}(x)=\frac{1}{2}m\omega^2\left(x-\frac{F}{m\omega^2}\right)^2-\frac{F}{2m\omega^2}-\varphi_0$$

и перейдем к безразмерным единицам

$$\xi=\frac{x-\dfrac{F}{m\omega^2}}{b};\quad \varepsilon=\frac{E}{E_0},$$

где $b=\left(\dfrac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$; $E_0=\dfrac{1}{2}\hbar\omega.$

Преобразуем стационарное уравнение Шрёдингера (2) к виду

$$\frac{\partial^2\psi(\xi)}{\partial\xi^2}+\left[\varepsilon-\xi^2+\Delta\varepsilon(F)\right]\psi(\xi)=0,$$

где

$$\Delta\varepsilon(F)=\frac{\left(\dfrac{F^2}{2m\omega^2}\right)}{E_0}+\frac{\varphi_0}{E_0}. \tag{3}$$

Таким образом, действие внешней силы на гармонический осциллятор приводит к смещению положения равновесия на расстояние $x_0=\dfrac{F}{m\omega^2}$ и сдвигу энергетического спектра. Собственные значения гамильтониана при этом определяются выражением

$$\varepsilon_n=2n+1-\Delta\varepsilon(F). \tag{4}$$

Решения уравнения Шрёдингера в этом случае имеют известный вид

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}\frac{1}{b^{n+1/2}}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H_n(\xi).$$

Одномерный нагруженный ангармонический осциллятор. Возмущение, описывающее ангармонический вклад, имеет вид

$$\Delta\hat{U} = -\frac{1}{3}\beta x^3. \tag{5}$$

Введя обозначение

$$\xi_0 = \frac{F}{bm\omega^2} = \frac{x_0}{b},$$

выражение (5) можно преобразовать к виду

$$\Delta\hat{U} = -\frac{1}{3}\beta b^3\left(\xi+\xi_0\right)^3 = -\frac{1}{3}\beta b^3\left(\xi^3+3\xi^2\xi_0+3\xi_0^2\xi+\xi_0^3\right).$$

Сдвиг энергетических уровней гармонического осциллятора, находящегося под действием постоянной внешней силы F, обусловленный ангармонизмом, в первом порядке теории возмущений

$$\varepsilon_n^{(1)} = \left\langle\psi_n\left|\Delta\hat{U}\right|\psi_n\right\rangle = -\frac{1}{3}\beta b^3\left\langle\psi_n\left|\xi^3+3\xi^2\xi_0+3\xi_0^2\xi+\xi_0^3\right|\psi_n\right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{3}\beta b^3\left(3\xi_0\left(n+\frac{1}{2}\right)+\xi_0^3\right).$$

Таким образом, энергию ангармонического осциллятора с гамильтонианом (1) можно записать в виде

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} = 2n+1-\frac{\frac{F^2}{2m\omega^2}+\varphi_0}{E_0}-\frac{\beta b^2 x_0\left(n+\frac{1}{2}\right)}{E_0}-\frac{\beta x_0^3}{3E_0} =$$

$$= 2n+1-\frac{\frac{F^2}{2m\omega^2}+\varphi_0}{E_0}-\frac{\beta b^2 F\left(n+\frac{1}{2}\right)}{m\omega^2 E_0}-\frac{\beta}{3E_0}\left(\frac{F}{m\omega^2}\right)^3.$$

Анализируя потенциал ненагруженного ангармонического осциллятора (1), помимо высоты барьера над дном потенциальной ямы $D = \dfrac{f^3}{6g^2}$ можно, следуя работе [10], ввести упругую силу

$$f=-\frac{\partial U}{\partial x}=-\mu\omega^2 x+\beta x^2.$$

Максимальное значение упругой силы (прочность связи на разрыв)

$$f_m=\frac{\left(m\omega^2\right)^2}{4\beta}.$$

Введем безразмерный параметр $g=\frac{F}{f_m}$ и преобразуем $\varepsilon_n^{(1)}$ к виду

$$\varepsilon_n^{(1)}=-\frac{\beta b^2 f_m}{m\omega^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)g-\frac{1}{3}\frac{\beta f_m^3}{\left(m\omega^2\right)^3}g^3,$$

сводя к минимуму число характеризующих систему параметров.

Таким образом, энергетический спектр ангармонического осциллятора, находящегося под постоянным внешним воздействием, имеет вид

$$\varepsilon_n=\varepsilon_n^{(0)}+\varepsilon_n^{(1)}=2n+1-\frac{\varphi_0}{E_0}+a_1 g+a_2 g^2+a_3 g^3,$$

где

$$a_1=-\frac{\beta b^2 f_m\left(n+\frac{1}{2}\right)}{E_0 m\omega^2}=-\frac{1}{2}(n+1);$$

$$a_2=-\frac{\frac{1}{2}\frac{f_m^2}{m\omega^2}}{E_0}=-\frac{m^3\omega^5}{16\beta^2\hbar};$$

$$a_3=-\frac{\beta f_m^3}{3E_0\left(m\omega^2\right)^3}=-\frac{m^3\omega^5}{96\beta^2\hbar}=\frac{a_2}{6}.$$

Заключение. Согласно полученным результатам, можно сделать вывод, что действие постоянной силы F на ангармонический осциллятор приводит к нелинейному по F сдвигу его энергетических уровней. Сопоставление с результатами расчета численными методами, приведенными в работе [10], показывает, что вывод работы [10] (линейность по F сдвига энергетических уровней) справедлив при выполнении условия

$$|a_1| = \frac{m^3\omega^5}{16\beta^2\hbar} \ll 1.$$

Используя для оценки этого параметра потенциал Леннарда – Джонса, получим

$$|a_1| = \frac{\sigma\sqrt{m\varphi_0 / 2}}{147\hbar}.$$

Оценка параметра $|a_1|$, выполненная для водорода H_2 с использованием значений констант потенциала Леннарда – Джонса [12], дает значение $|a_1| \approx 1{,}2 \cdot 10^{-3} << 1$; в то же время для кислорода O_2 аналогичная оценка приводит к результату $|a_1| \approx 4{,}6$. Таким образом, существует критерий применимости линейного приближения в оценке сдвига уровней энергии ангармонического осциллятора при действии постоянной внешней силы.

Полученные результаты могут быть использованы при изучении термодинамических и упругих свойств систем ангармонических квантовых осцилляторов, расчета термодинамических потенциалов, энтропии и получения уравнений состояния конденсированных сред, а также при исследовании систем твердотельных наночастиц.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Квасников И.А. *Термодинамика и статистическая физика. Т. 2: Теория равновесных систем. Статистическая физика*. Москва, Едиториал УРСС, 2002, 432 с.

[2] Квасников И.А. *Термодинамика и статистическая физика. Т. 3. Теория неравновесных систем. Статистическая физика*. Москва, Едиториал УРСС, 2003, 448 с.

[3] Коваленко А.Д. *Основы термоупругости*. Киев, Наукова думка, 1970, 309 с.

[4] Alvarez G, Howls C.J, Silverstone H.J., Harris J. Anharmonic oscillator diconti-nuiti formulae up to second exponentially small order. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2002, vol. 35(18). pp. 4003–4016.

[5] Alvarez G, Howls C.J, Silverstone H.J., Harris J. Dispersive hyperasymptotics and the anharmonic oscillator. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2002, vol. 35 (18). pp. 4017–4042.

[6] Amore P., Aranda A., De Pace A., Lopez J.A. Comparative study of quantum anharmonic potentials. *Phys. Lett. A.*, 2004, vol. 329, pp. 451–458.

[7] Jafarpour M., Afshar D. Calculation of energy eigenvalues for the quantum anharmonic oscillator with a polynomial potential. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2002, vol. 35. pp. 87–92.

[8] Розанов Н.Н., Смирнов В.А. Резонансное возбуждение и гистерезис в квантовом ангармоническом осцилляторе. *Письма в ЖЭТФ*, 1981, Т. 33, Вып. 10, с. 504–507.

[9] Болотин В.Л., Гончар В.Ю., Грановский М.Я., Чечкин А.В. Особенности динамики ангармонического осциллятора с периодическим возмущением. *ЖЭТФ*, 1999, т. 115, вып. 1, с. 361–377.

[10] Гиляров В.Л., Слуцкер А.И. Энергетика нагруженного квантового ангармонического осциллятора. *ФТТ*. 2010, т. 52, вып. 3, с. 540–544.

[11] Анималу А. *Квантовая теория кристаллических твердых тел*. Москва, Мир, 1981, 574 с.

[12] Никольский Б.П., ред. *Справочник химика. Т. 1: Общие сведения, строение вещества, свойства важнейших веществ, лабораторная техника*. Москва– Ленинград, Химия, 1966, 1071 с.

Статья поступила в редакцию 05.06.2013

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Еркович О.С., Ведерников А.А. Спектральные свойства квантового ангармонического осциллятора, находящегося под воздействием постоянной силы. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, вып. 8. URL: http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/868.html

Еркович Ольга Станиславовна родилась в 1962 г., окончила МГУ им. М.В. Ломоносова в 1984 г. Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 50 научных работ в области нерелятивистской квантовой механики. e-mail: erkovitch@bmstu.ru

Ведерников Андрей Андреевич родился в 1989 г. Студент МГТУ им. Н.Э. Баумана. Специализируется в области нерелятивистской квантовой механики. e-mail: vedernikovandrey@list.ru