

Энергетика нагруженного квантового ангармонического осциллятора

© В.Л. Гиляров, А.И. Слуцкер

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Alexander.Slutsker@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 24 июня 2009 г.

В окончательной редакции 1 августа 2009 г.)

Рассмотрен квантовый ангармонический осциллятор, находящийся в основном состоянии и нагружаемый внешней силой. Рассчитаны волновые функции при ряде значений силы и найдены собственные значения энергии системы в зависимости от нагрузки. Установлены линейное изменение нулевой энергии осциллятора как функции силы (уменьшение при растяжении и увеличение при сжатии) и линейные изменения средних кинетической и потенциальной составляющих энергии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 08-03-00148-а).

Ангармоничность (нелинейность) межатомного взаимодействия приводит к ряду эффектов при механическом нагружении твердых тел. Так, адиабатическое (т.е. достаточно медленное и в отсутствие теплового контакта со средой) упругое нагружение вызывает изменение фоновых частот и температуры тела (термоупругий эффект). При этом изменение тепловой энергии тела по величине и по знаку может сильно отличаться от совершенной механической работы нагружения тела.

Поскольку внутренняя динамика твердого тела является колебательной, ее можно рассматривать на основе ансамбля нелинейных осцилляторов, которые выступают элементами динамической системы. Тогда возникает задача анализа поведения отдельного ангармонического осциллятора при действии внешней силы.

Такой анализ был выполнен ранее для возбужденного ангармонического осциллятора классического вида (т.е. без дискретности уровней колебательной энергии, без нулевой энергии) [1–3]. Было показано, что в результате адиабатического нагружения после выхода нагружающей силы (как растягивающей, так и сжимающей) на стационарное значение происходят обусловленные ангармоничностью осциллятора изменения частоты осциллятора, колебательной энергии осциллятора, соотношения средних значений кинетической и потенциальной составляющих энергии осциллятора.

В отличие от классического осциллятора рассмотренные детали статического нагружения квантового ангармонического осциллятора не проводилось. Имеется много работ по определению собственных значений и волновых функций квантовых ангармонических осцилляторов с потенциалами различного порядка ангармонизма [4–9]. Есть работы по исследованию резонансных явлений при воздействии на нелинейный квантовый осциллятор периодической внешней силы [10]. Детальный же анализ воздействия постоянной силы на квантовый ангармонический осциллятор с выявлением закономерностей изменения средних значений кинетической и

потенциальных составляющих энергии системы отсутствовал.

В настоящей работе проводится рассмотрение энергетики адиабатически нагружаемого квантового ангармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии. Такое состояние отвечает твердому телу при нулевой температуре ($T = 0$).

Потенциальную яму для одномерного ангармонического осциллятора представим в форме кубического двучлена

$$U(x) = \frac{1}{2}fx^2 - \frac{1}{3}gx^3, \quad (1)$$

где f — коэффициент линейной упругости, g — коэффициент ангармоничности, x — смещение осциллятора из положения равновесия (т.е. относительно координаты дна ямы). Из (1) следуют выражения для исходной высоты барьера выхода частицы из потенциальной ямы (т.е. глубина ямы) $D = f^3/6g^2$; максимальной упругой силы (разрывной прочности связи) $F_m = f^2/4g$; эффективного радиуса взаимодействия (исходной разности координат дна ямы и вершины барьера) $x_0 = f/g$.

Возбуждение классического осциллятора в [1,3] задавалось назначением ему некоторой колебательной энергии E_{vibr} , выбираемой достаточно малой по сравнению с глубиной ямы ($E_{\text{vibr}}/D = 0.2$). Нагружение осциллятора задавалось также небольшой силой ($F \leq 0.2F_m$).

Для квантового осциллятора в основном состоянии задавать значение энергии возбуждения не требуется, так как, согласно соотношению неопределенностей, квантовый осциллятор в покое находиться не может и исходно является возбужденным, обладая нулевой энергией E_0 , значение которой отсчитывается от дна потенциальной ямы.

При дальнейших расчетах перейдем к безразмерным величинам, для чего введем соотношения $\xi = x(m\omega_0/\hbar)^{1/2}$, где m — масса колеблющейся частицы, $\omega_0 = \sqrt{f/m}$ (коэффициент f из (1), \hbar — постоянная

Планка). Безразмерный эффективный радиус взаимодействия $\xi_0 = x_0 \sqrt{m\omega_0/\hbar} = \sqrt{6D/\hbar\omega_0}$. Безразмерная внешняя сила равна $P = F/F_m = F4g/f^2$, а безразмерная энергия осциллятора $\lambda = E/\hbar\omega_0$.

Квантовый осциллятор в стационарном нагруженном состоянии (т.е. после установления постоянного значения силы P) описывается обычным стационарным уравнением Шредингера для волновой функции ψ

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x), \quad (2)$$

причем потенциальная энергия системы в поле внешней силы F имеет вид

$$V(x) = U(x) - Fx = \frac{1}{2} fx^2 - \frac{1}{3} gx^3 - Fx. \quad (2a)$$

Переходя к безразмерной форме, из (2) и (2a) получаем

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \psi + \left(\frac{1}{2} \xi^2 - \frac{\xi^3}{3\xi_0} - \frac{1}{4} P\xi\xi_0 \right) \psi = \lambda\psi. \quad (3)$$

Уравнение (3) требуется дополнить граничными условиями. Если потребовать ограничение волновой функции на бесконечности, то осциллятор окажется неустойчивым в том смысле, что за счет туннелирования частица рано или поздно покинет потенциальную яму. Чтобы это исключить, выбиралось условие равенства нулю волновой функции достаточно глубоко под барьером. При нулевой нагрузке выбирались граничные условия вида $\psi(\pm\xi_0/2) = 0$. А для того чтобы плавное приближение волновой функции к нулю происходило при всех значениях нагружающей силы, координаты зануления выбирались зависящими от внешней силы.

Уравнение Шредингера (3) вместе с граничными условиями решалось численно методом конечных элементов при ряде значений внешней силы до $P = \pm 0.2$

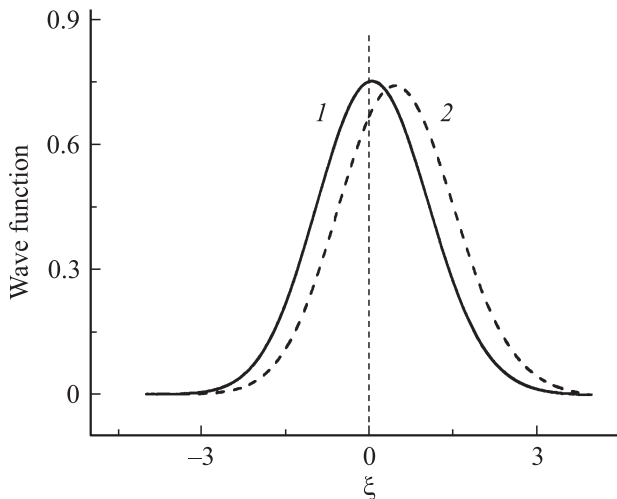


Рис. 1. Волновые функции основного состояния квантового ангармонического осциллятора. $P = 0$ (1) и 0.2 (2).

Параметры гауссовской аппроксимации волновых функций A , ξ_c , w и значения собственной энергии осциллятора λ при действии нагрузки P

P	A	ξ_c	w	λ
-0.2	6.98	-0.312	1.96	0.448
-0.1	7.01	-0.128	1.99	0.491
0	7.05	0.066	2.01	0.497
0.1	7.11	0.270	2.04	0.465
0.2	7.16	0.487	2.07	0.392

с шагом 0.1 при заданном значении $\xi_0 = 7.75$, что соответствует значениям кванта энергии осциллятора $\hbar\omega_0/D = 0.1$.

Были рассчитаны волновые функции $\psi(\xi)$ и собственные значения энергии осциллятора в основном состоянии λ при всех задаваемых значениях внешней силы. Примеры найденных волновых функций для исходного (ненагруженного, $P = 0$) осциллятора и для нагруженного ($P = 0.2$) приведены на рис. 1. Видно, что функции $\psi(\xi)$ имеют колоколообразную форму с максимумом в районе небольших значений ξ и в соответствии с граничными условиями плавно спадают до нуля в районе $\xi \approx \pm 4$. Уже в ненагруженном состоянии максимум волновой функции несколько смещен относительно координаты дна ямы (положения равновесия), что связано с ангармоничностью осциллятора. Как видно из того же рисунка, приложение положительной внешней силы приводит к сдвигу максимума в сторону положительных значений ξ .

С помощью полученных волновых функций можно находить средние значения различных величин z по стандартной формуле расчета средних в квантовой механике

$$\langle z \rangle = \frac{\int \psi^*(\xi) \hat{z} \psi(\xi) d\xi}{\int \psi(\xi) \psi^*(\xi) d\xi}, \quad (4)$$

где \hat{z} — оператор усредняемой величины.

Для конкретных расчетов удобно использовать аналитические выражения для волновых функций. Для этой цели рассчитанные методом конечных элементов волновые функции основного состояния ангармонического осциллятора аппроксимировались гауссовскими зависимостями, характерными для волновой функции гармонического осциллятора, но смещенными относительно координаты $\xi = 0$

$$\psi(\xi) \approx \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} \exp\left(-2 \frac{(\xi - \xi_c)^2}{w^2}\right). \quad (5)$$

Параметры аппроксимации (амплитуда A , смещение ξ_c и дисперсия w) определялись методом наименьших квадратов. Они приведены в таблице для различных значений силы P .

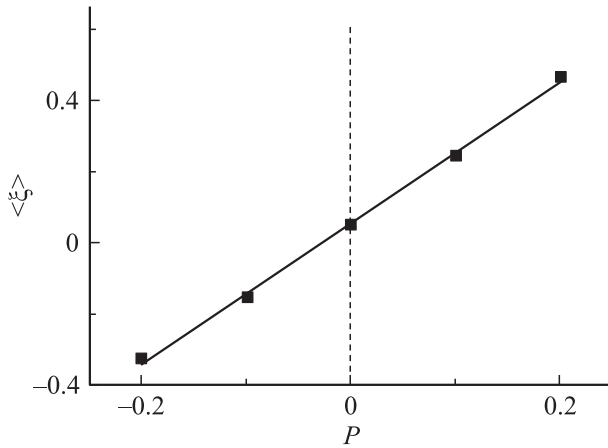


Рис. 2. Силовая зависимость безразмерной средней координаты квантового ангармонического осциллятора.

Средние значения координаты $\langle \xi \rangle$ находили по формуле (4), где в качестве оператора выступала сама величина ξ . Следует отметить, что при избранной гауссовой аппроксимации (5) и интегрировании в (4) от $-\infty$ до $+\infty$ получаем $\langle \xi \rangle = \xi_c$. Таким образом, среднее значение координаты осциллятора $\langle \xi \rangle$ приближенно равно смещению от $\xi = 0$ максимума аппроксимирующей волновой функции.

Силовая зависимость величины $\langle \xi \rangle$ представлена на рис. 2. Как видно, эта зависимость близка к линейной и поэтому может быть описана выражением

$$\langle \xi \rangle(P) \approx \langle \xi \rangle_0 + \frac{\Delta \langle \xi \rangle}{\Delta P} P. \quad (6)$$

Значение $\langle \xi \rangle_0 \approx 0.066$ в отсутствие внешней силы обусловлено нелинейной упругостью (ангармоничностью) осциллятора. Подобная средняя деформация, пропорциональная энергии возбуждения, имеет место и в ненагруженном классическом ангармоническом осцилляторе [1,3,11].

Покажем, что силовая зависимость $\langle \xi(P) \rangle$ отвечает средней упругой деформации связи. Действительно, из (1) следует, что при невысоких нагрузках коэффициент упругости связи $\Delta F / \Delta x \approx f$. В безразмерных единицах с учетом $D / \hbar \omega = 10$ получаем $\Delta P / \Delta \langle \xi \rangle \approx 2$, что соответствует обратному наклону линейной зависимости на рис. 2. Таким образом, силовое смещение средней координаты осциллятора соответствует упругой статической деформации связи в осцилляторе, т.е. смещению дна потенциальной ямы. Такое смещение при адиабатическом нагружении вызывает энергетическое снижение дна ямы на величину $\Delta W_{\text{pot}} \approx -15P^2/8$ (в размерных единицах $\Delta E_{\text{pot}} \approx -F^2/2f$ [2]).

Обратимся к найденным собственным значениям энергии λ . Эти значения для разной величины внешней силы приведены в таблице. Прежде всего отметим, что значение $\lambda(0)$ является величиной исходной нулевой

энергии осциллятора $W_0(0) \approx 0.497$. Для гармонического осциллятора безразмерная нулевая энергия равна $1/2$. Отличие $W_0(0)$ от $1/2$ связано с ангармоничностью осциллятора.

Нулевая энергия квантового осциллятора, так же как и колебательная энергия классического осциллятора, отсчитывается от дна потенциальной ямы. Тогда безразмерная нулевая энергия определяется через найденное собственное значение энергии

$$W_0(P) \approx \lambda(P) - \Delta W_{\text{pot}} \approx \lambda(P) + \frac{15}{8} P^2.$$

Зависимость нулевой энергии $W_0(P)$ представлена на рис. 3. Эта зависимость близка к линейной и, как следует из рис. 3, с хорошей степенью точности описывается выражением

$$W_0(P) \approx W_0(0) - \frac{1}{4} W_0(0) P, \quad (7)$$

Отметим, что зависимость (7) совпадает с силовой зависимостью колебательной энергии классического осциллятора [1,3].

Таким образом, в результате квантово-механического рассмотрения нагруженного ангармонического осциллятора установлено изменение нулевой энергии: уменьшение при растяжении и возрастание при сжатии. Изменение нулевой энергии осциллятора обусловлено его ангармоничностью.

В ангармоническом осцилляторе (в отличие от гармонического) нагружение вызывает изменение коэффициента линейной упругости f в выражении (1) [12]: $f(P) = f \sqrt{1-P} \approx f(1-P/2)$. Классическая частота осциллятора $\omega \approx \sqrt{f/m}$, и тогда $\omega(P) \approx \omega(1-P/4)$. Нулевая энергия квантового осциллятора выражается через частоту классического осциллятора в той же потенциальной яме [13]: $W_0 = \hbar \omega / 2$. Тогда $W_0(P) \approx \hbar \omega(P) / 2 \approx W_0 - W_0 P / 4$, т.е. зависимость $W_0(P)$

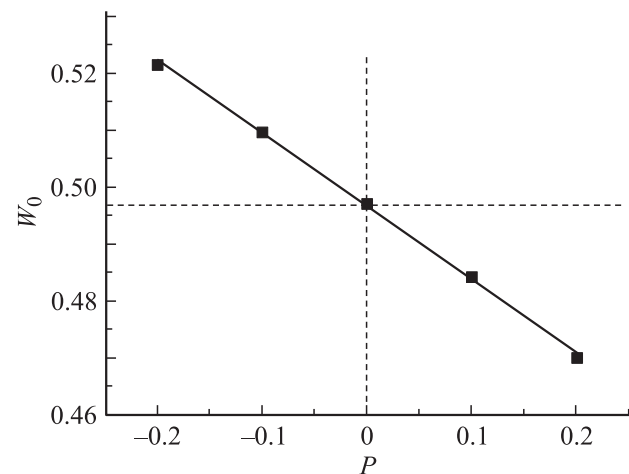


Рис. 3. Силовая зависимость нулевой энергии квантового ангармонического осциллятора.

именно та, которая следует из данных рис. 3. Механизм обмена энергии нагружаемого квантового осциллятора с внешним полем связан с уже отмеченным выше средним положительным растяжением связи $\langle \xi \rangle_0 \approx 0.066$ при $P = 0$ (т.е. в ненагруженном осцилляторе), обусловленным ангармоничностью потенциальной ямы. Эта ангармоническая деформация связи приводит к изменению потенциала осциллятора во внешнем поле (отрицательном при $P > 0$ и положительном при $P < 0$) и тем самым к соответствующему изменению нулевой энергии.

Обратимся теперь к детализации энергетики квантового осциллятора во внешнем поле.

Найдем средние значения кинетической и потенциальной энергии осциллятора для различных значений нагружающей силы. Для этого вновь используем гауссову аппроксимацию волновых функций (5).

Среднее значение кинетической энергии находим по формуле (4), подставляя в качестве усредняемой величины оператор $\hat{E}_{\text{kin}} = -\hbar^2/2m\partial^2/\partial x^2$. В результате для безразмерной величины кинетической энергии получим

$$\langle W_{\text{kin}} \rangle(P) \approx 1/w^2(P),$$

где w — величина дисперсии аппроксимирующей волновой функции, значения которой приведены в таблице.

Интересно отметить установленную обратно пропорциональную связь кинетической энергии с дисперсией, т.е. координатным размытием волновой функции, а следовательно, и с характерной областью локализации частицы в потенциальной яме. Очевидно, что эта связь выступает проявлением квантово-механического соотношения неопределенностей: чем более локализована частица, тем менее точно известен ее импульс и соответственно кинетическая энергия.

Силовая зависимость средней кинетической энергии осциллятора $\langle W_{\text{kin}} \rangle(P)$ приведена на рис. 4. Как видно, эта зависимость близка к линейной и, как следует из графика на рис. 4, удовлетворительно описывается функцией

$$\langle W_{\text{kin}} \rangle(P) \approx \langle W_{\text{kin}} \rangle(0) - \frac{1}{8} W_0(0)P. \quad (8)$$

Отметим, что такая же зависимость средней кинетической энергии от приложенной силы была получена для классического ангармонического осциллятора [3]. Однако, как уже отмечалось, в квантовом случае изменение кинетической энергии, вызываемое действием приложенной силы, связано с изменением степени локализации частицы в ангармонической потенциальной яме, т.е. проявлением соотношения неопределенностей, которое классическому осциллятору не присуще. Фигурирующая здесь средняя кинетическая энергия является также кинетической составляющей нулевой энергии квантового осциллятора.

Перейдем к рассмотрению потенциальной составляющей энергии осциллятора во внешнем поле. Она

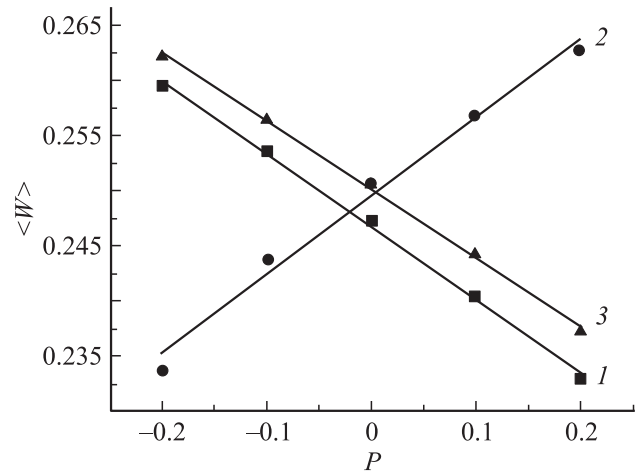


Рис. 4. Силовые зависимости средних значений кинетической (1) и потенциальных составляющих внутренней (2) и нулевой (3) энергий квантового ангармонического осциллятора.

определяется выражением (2а), или в безразмерных переменных

$$W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \xi^2 - \frac{1}{3} \xi^3 - \frac{1}{4} P \xi \xi_0.$$

При этом первые два члена представляют потенциальную энергию упругой деформации связи, и поэтому ее естественно назвать внутренней энергией осциллятора $W_{\text{pot}}^{\text{int}}$, а последний член — потенциал внешней силы. Среднее значение W_{pot} , полученное по формуле (4), где оператор потенциальной энергии просто совпадает с ее величиной, имеет вид

$$\begin{aligned} \langle W_{\text{pot}} \rangle &\approx \frac{\xi_c^2}{2} - \frac{\xi_c^3}{3\xi_0} + \frac{w^2}{16} (1 - 2\xi_c/\xi_0) - \frac{1}{4} P \xi_c \xi_0 \\ &= \langle W_{\text{pot}}^{\text{int}} \rangle - \frac{1}{4} P \xi_c \xi_0, \end{aligned} \quad (9)$$

причем первые три члена представляют собой среднее значение внутренней потенциальной энергии осциллятора $\langle W_{\text{pot}}^{\text{int}} \rangle$.

В средней внутренней потенциальной энергии осциллятора может быть выделена статическая часть $\langle W_{\text{pot}}^{\text{stat}} \rangle \approx 15P^2/8$ — энергия упругой деформации связи до нового положения равновесия. Остальная часть этой энергии может быть названа динамической аналогично классическому случаю [3] $\langle W_{\text{pot}}^{\text{dyn}} \rangle = \langle W_{\text{pot}}^{\text{int}} \rangle - \langle W_{\text{pot}}^{\text{stat}} \rangle$.

Отметим, что в классическом случае эта динамическая составляющая энергии отвечает буквальным ангармоническим колебаниям частицы. В квантовом случае имеет место специфическая квантовая динамика с присущей ей энергией.

Силовая зависимость найденной средней динамической составляющей внутренней потенциальной энергии представлена на рис. 4 в сопоставлении с зависимостью кинетической энергии. Видно, что зависимость $\langle W_{\text{pot}}^{\text{dyn}} \rangle(P)$ близка к линейной и, что важно

подчеркнуть, зеркальна по отношению к зависимости кинетической энергии $\langle W_{\text{kin}} \rangle(P)$. Поэтому сумма этих величин постоянна и не зависит от нагрузки. Из этого следует важное положение: поскольку до нагружения (при $P = 0$) $\langle W_{\text{kin}}(0) + W_{\text{pot}}(0) \rangle = W_0$ — исходной энергии осциллятора, значит, $\langle W_{\text{kin}}(P) + W_{\text{pot}}^{\text{dyn}}(P) \rangle = W_0$. Это означает, что вся энергия, которую осциллятор взял из поля внешней силы, пошла на статическую деформацию связи. Подобная закономерность получена в энергетике нагружаемого классического ангармонического осциллятора [3].

Следует отметить, что средние значения кинетической и потенциальной составляющих внутренней энергии осциллятора не являются независимыми — они связаны между собой теоремой вириала [14]. Поэтому изменение одной из величин приводит к изменению другой — перераспределению средних значений энергии.

Определим также еще одну характеристику потенциальной энергии — среднее значение потенциальной составляющей нулевой (колебательной) энергии $\langle W_0^{\text{pot}} \rangle$. Поскольку, как показано выше,

$$W_0(P) = \langle W_{\text{kin}} \rangle(P) + \langle W_0^{\text{pot}} \rangle(P) \approx W_0(0) - W_0(0)P/4$$

и

$$\langle W_{\text{kin}}(0) + W_{\text{pot}}^{\text{dyn}}(0) \rangle = W_0,$$

следовательно,

$$\langle W_0^{\text{pot}} \rangle(P) = \langle W_{\text{pot}}^{\text{dyn}} \rangle(P) - W_0(0)P/4.$$

Силовая зависимость этой величины также приведена на рис. 4. Являясь комбинацией двух линейных зависимостей, она также близка к линейной и проходит параллельно зависимости $\langle W_{\text{kin}} \rangle(P)$, но несколько выше, что соответствует теореме вириала [14].

Можно видеть, что средние потенциальные составляющие $\langle W_{\text{pot}}^{\text{dyn}} \rangle(P)$ и $\langle W_0^{\text{pot}} \rangle(P)$ образуют еще одну „зеркальную“ систему. Вместе с предыдущей „зеркальностью“ $\langle W_{\text{pot}}^{\text{dyn}} \rangle(P)$ и $\langle W_{\text{kin}} \rangle(P)$ можно заключить, что в нагружаемом ангармоническом осцилляторе (как квантовом, так и классическом) происходят процессы своеобразного перераспределения различных составляющих энергии — кинетической и потенциальных.

Список литературы

- [1] В.Л. Гиляров, А.И. Слуцкер, В.П. Володин, Л.А. Лайус. ФТТ **39**, 153 (1997).
- [2] А.И. Слуцкер, Л.А. Лайус, В.Л. Гиляров, И.В. Гофман, Ю.И. Поликарпов, Б.А. Аверкин. В сб.: Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела / Под ред. К.Ф. Черныха. Изд-во СПбГУ, СПб (2002). В. 5. С. 155.
- [3] А.И. Слуцкер, В.Л. Гиляров, А.И. Лукьяненко. ФТТ **48**, 1832 (2006).
- [4] G. Alvarez, C.J. Howls, H.J.J. Silverstone. Phys. A: Math. Gen. **35**, 4017 (2002).
- [5] P. Amore, A. Aranda, A.De Pace. J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 3515 (2004).
- [6] S. Dusuel, G.S. Uhrig. J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 9275 (2004).
- [7] A. Turbinder. Lett. Math. Phys. **74**, 169 (2005).
- [8] M. Jafarpour, D. Afshar. J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 87 (2002).
- [9] E.Z. Liverts, B. Mandelzweig. Phys. Scripta **77**, 025 003 (2008).
- [10] Н.Н. Розанов, В.А. Смирнов. Письма в ЖЭТФ **33**, 504 (1981).
- [11] Я.И. Френкель. Кинетическая теория жидкостей. Наука, М. (1975). 460 с.
- [12] Р.Х. Сабиров. ФТТ **26**, 1358 (1984).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989). 768 с.
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Механика. Физматгиз, М. (1958). 208 с.