07,19

Баланс энергии в механике деформирования твердого тела при низких температурах

© Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: n.gorobey@mail.ru

(Поступила в Редакцию 24 января 2014 г.)

Для анализа баланса энергии в процессе адиабатического механического нагружения твердого тела при низких температурах рассмотрена модель твердого тела в виде ансамбля независимых ангармонических осцилляторов, находящихся в однородном силовом поле. Удлинение осциллятора определено как среднее по ансамблю, и этой величине сопоставлена часть его энергии. Последняя имеет физический смысл механической энергии деформации образца и является частью энергетического баланса при деформировании. После усреднения однородное силовое поле заменяется равнодействующей силой, связанной со средней деформацией. Другой составляющей баланса при низких температурах является энергия нулевых колебаний осцилляторов. Таким образом, при механическом деформировании твердого тела обмен энергией осуществляется между двумя масштабными уровнями: энергией колебаний атомов на микроуровне и макроскопической энергией деформации образца в целом.

1. Введение

Нелинейность межатомного взаимодействия в твердом теле проявляется в ряде эффектов при его механическом деформировании. Одним из них является термоупругий эффект — понижение температуры образца при его адиабатическом механическом растяжении (и, наоборот, увеличение температуры при сжатии) [1]. Нелинейность (ангармонизм) приводит здесь к перераспределению между различными составляющими внутренней энергии образца: потенциальной энергией упругой деформации и энергией колебаний атомов, пропорциональной абсолютной температуре. Указанное перераспределение энергии имеет место и при низких температурах, когда энергия колебаний атомов сводится к квантово-механической энергии нулевых колебаний, в основном определяемой их классической частотой. Поэтому в низкотемпературном пределе говорят о частотно-упругом эффекте [2,3]. Проблема энергетического баланса в термоупругом эффекте обсуждалась в [4,5]. Для анализа энергетического баланса в случае частотно-упругого эффекта следует привлекать квантовую механику, и этому посвящена работа [6]. Однако, несмотря на кажущуюся простоту рассматриваемой системы, физический смысл различных составляющих энергии колеблющегося ангармонического осциллятора, между которыми происходит перераспределение, остался неясным. К этому вопросу вновь возвращаются авторы работы [7], по сути сводят задачу к анализу структуры энергии нулевых колебаний свободного ангармонического осциллятора. Суть предложенного в [7] физического объяснения этой структуры сводится к следующему: фундаментальные квантово-механические колебания ангармонического осциллятора порождают эффективную силу, действующую на сам осциллятор (нелинейность), которая „растягивает“ его. Это растяжение (квантово-механическое среднее отклонение координаты осциллятора от дна потенциальной ямы) вызывает смягчение его частоты, которому сопоставлена часть энергии нулевых колебаний, имеющая второй порядок малости по константе ангармонизма. После добавления этой величины к ангармонической поправке к энергии, вычисленной в рамках теории возмущений [8], получается величина, близкая к потенциальной энергии гармонического осциллятора, растянутого упомянутой эффективной силой. Таким образом, во втором приближении по константе ангармонизма нулевая энергия ангармонического осциллятора (с некоторой погрешностью) представлена в виде суммы „смягченной“ нулевой энергии и потенциальной энергии деформации осциллятора. Между этими составляющими энергии и происходит перераспределение при нагружении.

Сформулированные в такой конкретной физической форме структура энергии нулевых колебаний ангармонического осциллятора и последующие эффекты действия нагрузки делают постановку задачи о балансе энергии предельно четкой. В то же время предложенная физическая картина оставляет неясными некоторые вопросы, которые, по нашему мнению, требуют уточнения. В большинстве упомянутых выше работ энергетический баланс в термоупругом (частотно-упругом) эффекте рассматривался в рамках простой одноосцилляторной модели. В работе [7] уточняется, что речь идет о модели Эйнштейна твердого тела. Это означает, что фактически рассматривается большой ансамбль независимых осцилляторов, находящихся в однородном силовом поле. Если угодно, это модель Эйнштейна механически деформируемого твердого тела. Но в большом ансамбле определение средних величин, в том числе квантово-механических, допускает альтернативу — усреднение по ансамблю. Наше первое замечание касается как раз определения среднего удлинения колеблющегося ангармонического осциллятора, рассматриваемого в работах [6,7] как абстрактное квантово-механическое среднее. Именно это квантово-механическое среднее так или иначе предполагает усреднение по ансамблю. Поэтому в настоящей работе предложено рассматривать среднее удлинение как среднее по реальному большому ансамблю. Это не формальная замена. Фактически вместо среднего удлинения будет введена новая коллективная переменная, которая в большом ансамбле играет роль параметра порядка и может считаться свободной от флуктуаций, в том числе квантово-механических. В связи с этим возникает второе замечание, которое касается определения упругой энергии осциллятора, отвечающей упомянутой средней деформации. В работе [7] она записывается простой классической формулой для потенциальной энергии гармонического осциллятора, хотя речь идет об энергии квантово-механических нулевых колебаний. В отличие от этого, мы ожидаем, что выделенной в ансамбле осцилляторов коллективной переменной — среднему удлинению осциллятора — будет автоматически соответствовать часть энергии ансамбля. Третье замечание касается действия силового поля на осцилляторы. Как показано далее, в результате усреднения по ансамблю это силовое поле заменяется равнодействующей силой, приложенной к выделенной коллективной переменной. Остальные колебательные степени свободы большого ансамбля оказываются свободными от силового воздействия, но в силу ангармонизма взаимодействуют со средним удлинением.

Принимая упомянутый большой ансамбль в качестве модели деформируемого твердого тела, мы можем вернуться к вопросу о балансе энергии и тех составляющих, между которыми он реализуется. Одна из составляющих — упомянутая выше энергия коллективной переменной. Она сопоставляется макроскопической деформации, свободной от флуктуаций, и может меняться за счет работы внешней силы, но не только внешней. Есть еще взаимодействие с остальными колебательными переменными. Эти колебательные переменные будем называть микроскопическими, поскольку для них сохраним квантово-механическое описание. Их энергия квантована, так что частота нулевых колебаний осциллятора измеряется спектроскопическими методами по частоте поглощения (фотонов). Таким образом, составляющие в балансе энергии теперь „разнесены“ на разные масштабные уровни большого ансамбля: это энергия макроскопической деформации образца и „смягченная“ микроскопическая энергия нулевых колебаний.

Разумеется, все осцилляторы в модели Эйнштейна деформируемого твердого тела остаются независимыми, и реально перераспределение энергии происходит в каждом из них. Но переход к описанию этого баланса в рамках реального большого ансамбля независимых осцилляторов ничему не противоречит. В то же время он позволяет все неявные процедуры усреднения наблюдаемых величин для одного осциллятора сделать явными. Наконец, предлагаемая здесь простая модель ансамбля несвязанных осцилляторов допускает естественное обобщение на случай более реалистичной модели деформируемого твердого тела как большой системы связанных ангармонических осцилляторов. В этом случае усреднение по ансамблю следует понимать как самоусреднение в большой системе.

2. Ансамбль адиабатически нагружаемых ангармонических осцилляторов

Перейдем к математической формулировке модели. Систему N невзаимодействующих одномерных ангармонических осцилляторов, деформируемых силой $F(t)$, зададим лагранжианом

$$L = \sum_{k=1}^{N}\left[\frac{m\dot{x}_k^2}{2} - \frac{fx_k^2}{2} + \frac{gx_k^3}{3} + Fx_k\right], \tag{1}$$

где x_k, $k = 1, 2, .., N$ — координаты осцилляторов. Условие адиабатичности нагружения здесь означает, что сила $F(t)$ изменяется медленно (по сравнению с периодом собственных колебаний осциллятора), а также отсутствие других взаимодействий системы с окружающей средой. Введем сразу интересующую нас динамическую переменную — среднюю по ансамблю координату осциллятора z, записав

$$x_k = z + u_k, \qquad \sum_{k=1}^{N} u_k = 0. \tag{2}$$

В новых переменных лагранжиан (1) запишется в виде

$$L = N\left[\frac{m\dot{z}^2}{2} - \frac{fz^2}{2} + \frac{gz^3}{3} + Fz\right] + \sum_{k=1}^{N}\left[\frac{m\dot{u}_k^2}{2} - \frac{\tilde{f}u_k^2}{2} + \frac{gu_k^3}{3}\right], \tag{3}$$

где

$$\tilde{f} \equiv f - 2gz \tag{4}$$

— „смягченная“ упругая постоянная. Обратим внимание на то, что сила $F(t)$ действует только на „средний“ осциллятор z. Кроме того, теперь мы имеем систему связанных осцилляторов: „средний“ осциллятор z взаимодействует с остальными через смягченную упругую постоянную (4), а остальные микроскопические осцилляторы u_k связаны между собой благодаря добавочному условию в (2). Действительно, часть лагранжиана (3), отвечающая микроскопическим переменным, с учетом (2) принимает вид

$$\sum_{l,m=1}^{N-1} \widehat{K}_{lm}\left(\frac{m\dot{u}_l\dot{u}_m}{2} - \frac{\tilde{f}u_lu_m}{2}\right) + \frac{g}{3}\sum_{l,m,n=1}^{N-1} \widehat{M}_{lmn}u_lu_mu_n, \tag{5}$$

где

$$\widehat{K}_{lm} \equiv \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & 2 & 1 & \dots \\ 1 & 1 & 2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Ангармоническую добавку к этой части лагранжиана в общем случае воспроизвести сложно. Приведем лишь ее вид в случае $N = 3$

$$-gu_1u_2(u_1 + u_2), \qquad (7)$$

В случае $N = 2$ ангармоническая добавка вообще отсутствует. Нас, конечно, интересует случай $N \to \infty$.

Для того чтобы определить нормальные колебания в микроскопической подсистеме ансамбля, необходимо диагонализовать матрицу (6). Здесь мы этого делать не будем, поскольку и так видно, что все частоты нормальных колебаний равны „смягченной" частоте исходного осциллятора $\omega = \sqrt{\tilde{f}/m}$, как и следовало ожидать. Спектр собственных значений матрицы (6) определяет лишь некоторое распределение микроскопических осцилляторов по группам с соответствующими весами. После квантования микроскопической подсистемы для энергии нулевых колебаний одного осциллятора с точностью до второго порядка по константе ангармонизма получим

$$E_0 \approx \frac{1}{2}\hbar\omega + \alpha\frac{g^2}{f^3}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)^2, \qquad (8)$$

где безразмерная постоянная α определяется ангармонической добавкой в (5) и с указанной точностью не зависит от z и действия внешней нагрузки. К этой ангармонической поправке мы еще вернемся при анализе энергетического баланса в следующем разделе.

Прежде чем перейти к этому анализу, более четко сформулируем основания, по которым мы оставляем динамику коллективной переменной z классической. Квантовая динамика системы описывается решением уравнения Шредингера, которое определяет так называемый оператор эволюции. В фейнмановском представлении [9] оператора эволюции ведется функциональное интегрирование по траекториям в конфигурационном пространстве комплексной экспоненты

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int Ldt\right), \qquad (9)$$

где под знаком интеграла действия стоит лагранжиан (3). Как мы знаем, обратный переход от квантовой механики к классической реализуется в квазиклассическом приближении [8], когда постоянную Планка можно считать малой по сравнению с классическим действием системы. В нашем случае часть действия, отвечающая коллективной переменной z (первое слагаемое в (3)) содержит большой множитель N, что дает основание указанную часть системы с большой точностью считать классической. Это означает, что переменная z в любой момент времени имеет определенное значение и не подвержена квантовым флуктуациям (в функциональном интеграле не ведется интегрирование по этой переменной). Само значение $z(t)$ определяется классическими законами движения.

3. Баланс энергии в квантовом ансамбле ангармонических осцилляторов

Для того чтобы увидеть, в чем заключается баланс энергии в квантовом ансамбле нагружаемых ангармонических осцилляторов, достаточно просто сформулировать согласованную динамику классической коллективной переменной z и квантовой микроскопической подсистемы осцилляторов u_k. Сначала запишем классическую функцию Гамильтона ансамбля

$$H = H_z + h, \qquad (10)$$

где

$$H_z \equiv H_0(z, p_z, t) - F(t)z = N\left[\frac{p_z^2}{2m} + \frac{fz^2}{2} - \frac{gz^3}{3}\right] - F(t)z, \qquad (11)$$

$$h(u_k, p_k) \equiv \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N-1}\left[\frac{1}{m}(\widehat{K}^{-1})_{lm}p_l^2p_m^2 + \tilde{f}\widehat{K}_{lm}u_lu_m\right] + g\sum_{l,m,n=1}^{N-1}\widehat{M}_{lmn}u_lu_mu_n. \qquad (12)$$

Согласно нашему допущению, квантованию подлежит микроскопическая колебательная часть системы, описываемая функцией Гамильтона (12). Мы пока не накладываем условие медленности изменения внешней силы, поэтому запишем квантово-классическое действие, описывающее согласованную динамику классической степени свободы z и квантовых осцилляторов u_k в общем виде:

$$S_q = \int dt\left[\frac{i\hbar}{2}\left(\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\dot{\psi}|\psi\rangle\right) + p_z\dot{z}\langle\psi|\psi\rangle - H_z\langle\psi|\psi\rangle - \langle\psi|\widehat{h}|\psi\rangle\right], \qquad (13)$$

где точкой обозначается производная по времени, а скобками — скалярное произведение в пространстве волновых функций $\psi(t, u_k)$

$$\langle\psi|\chi\rangle \equiv \int\prod d^{N-1}u\bar{\psi}(t, u_k)\chi(t, u_k). \qquad (14)$$

Действие (13) определяет согласованную квантово-классическую динамику ансамбля. Вариация (13) по $\bar{\psi}$

дает уравнение Шредингера для микроскопического колебательного сектора ансамбля

$$i\hbar\dot{\psi} = [-p_z\dot{z} + H_z + \widehat{h}]\psi, \tag{15}$$

в котором первые два слагаемых справа — классические функции времени. Они в свою очередь определяются уравнениями Гамильтона

$$\dot{p}_z = -\frac{\partial H_z}{\partial z}, \tag{16}$$

$$\dot{z} = \frac{\partial H_z}{\partial p_z}, \tag{17}$$

которые также следуют из (13). Функции времени в гамильтониане уравнения Шредингера (15) влияют только на фазу волновой функции, и их можно исключить.

Вернемся к вопросу о балансе энергии. В общем случае следствием системы уравнений движения (15)–(17) является закон изменения энергии ансамбля под действием внешней силы

$$A = N\int F dz = \Delta W, \tag{18}$$

где

$$W = W_z + W_u, \tag{19}$$

$$W_z = N\left[\frac{p_z^2}{2m} + \frac{fz^2}{2} - \frac{gz^3}{3}\right] \tag{20}$$

— энергия макроскопической коллективной степени свободы,

$$W_u = \frac{\langle\psi|\ \widehat{h}\ |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{21}$$

— энергия квантовой подсистемы ансамбля.

Начнем анализ с простейшей ситуации, когда отсутствует внешняя сила, а квантовая подсистема находится в основном состоянии. Тогда энергия ансамбля в расчете на один осциллятор приближенно равна

$$E \equiv \frac{W}{N} \approx \frac{fz^2}{2} + \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{22}$$

Здесь мы отбросили кинетическую энергию макроскопической деформации и слагаемые второго порядка по константе ангармонизма в обеих частях внутренней энергии ансамбля. Этого нам достаточно для нахождения статической средней деформации осциллятора в основном состоянии с точностью до первого порядка по константе ангармонизма. Уравнение движения (16) в этом случае превращается в условие статического равновесия и дает

$$z \approx \frac{g}{f^2}\frac{1}{2}\hbar\omega_0, \tag{23}$$

где ω_0 — собственная частота осциллятора без ангармонизма. Подстановка (23) в (22) приводит к следующему значению энергии нулевых колебаний осциллятора с точностью до второго порядка по константе ангармонизма:

$$E \approx \frac{1}{2}\hbar\omega_0 - \frac{1}{8}\frac{g^2}{f^3}\hbar\omega_0. \tag{24}$$

Этот результат отличается от значения энергии нулевых колебаний, вычисленного с помощью теории возмущений с точностью до второго порядка по константе ангармонизма [8]. Однако следует еще учесть ангармонизм микроскопической подсистемы ансамбля. Речь идет о втором слагаемом в правой части формулы (8). Как было отмечено выше, эта поправка в нашей модели не связана со „смягчением“ частоты, обусловленным взаимодействием с макроскопической деформацией z, а значит, не будет зависеть и от нагрузки. Она должна быть вычислена независимо с точностью до второго порядка по константе ангармонизма для довольно громоздкого гамильтониана (12), отвечающего микроскопическим колебательным степеням свободы. Мы ожидаем, что в пределе $N \to \infty$ суммарная поправка второго порядка будет иметь требуемое значение [8]. Тем самым с указанной точностью должна быть получена энергия нулевых колебаний ангармонического осциллятора, но теперь с выделением в ней упругой энергии макроскопической средней деформации осциллятора. Мы считаем, что это позволит уточнить приближенный характер структуры нулевой энергии, предложенный в [7]. В настоящей работе мы оставим это в качестве предположения и завершим анализ объяснением собственно частотно-упругого эффекта.

Воспользовавшись теперь условием адиабатичности нагружения, систему уравнений (16), (17) сведем к условию квазистатического равновесия в каждый момент действия нагрузки

$$fz - gz^2 = F + F_0, \tag{25}$$

где

$$F_0 = g\langle u^2\rangle \tag{26}$$

— сила, действующая на коллективную макроскопическую степень свободы z со стороны микроскопических колебательных степеней свободы ансамбля. Назовем ее силой давления нулевых колебаний. Среднее значение квадрата амплитуд нулевых колебаний в микроскопической подсистеме ансамбля (в правой части выражения (26)) следует вычислять опять с использованием довольно громоздкого гамильтониана (12). Но в первом приближении по константе ангармонизма ответ очевиден:

$$F_0 \approx \frac{g}{f}\frac{1}{2}\hbar\omega_0. \tag{27}$$

Это как раз та самая сила нулевого давления, которая вызывает статическую деформацию (23). Но теперь к ней добавляется внешняя сила, и с точностью до первого порядка по константе ангармонизма средняя деформация равна

$$z \approx \frac{F}{f} + \frac{g}{f^2}\frac{1}{2}\hbar\omega_0. \qquad (28)$$

Эту величину следует подставить в выражение (22) и вычислить его с точностью до первого порядка по константе ангармонизма. При этом следует воспользоваться также адиабатическим приближением для решения уравнения Шредингера (15). Получим, что с указанной точностью баланс между приращением упругой энергии средней деформации осциллятора в ансамбле и энергией „смягчения“ его частоты сохранится — с той лишь разницей, что к первой величине добавится упругая энергия $F^2/2f$, равная работе внешней силы.

4. Заключение

Возвратимся еще раз к вопросу об „источниках“ энергии, между которыми происходит обмен в частотно-упругом эффекте. Повторим, что в данной модели осцилляторы являются независимыми и перераспределение энергии происходит „внутри“ каждого из них. Весь вопрос в том, как определять средние значения тех величин, которые мы выделяем в качестве составляющих энергии. В любом случае в квантовой теории подразумевается усреднение по ансамблю. А если так, естественно перенести анализ энергетического баланса на весь ансамбль, что и сделано в настоящей работе. Тем более что это рассмотрение легко обобщается на случай реальной модели деформируемого твердого тела, представляющего собой систему связанных ангармонических осцилляторов. Это обобщение станет предметом последующего рассмотрения.

Авторы благодарят А.И. Слуцкера и В.Л. Гилярова за стимулирующие обсуждения.

Список литературы

[1] J.P. Joule. Proc. Roy. Soc. **58**, 564 (1857).
[2] F.G. Wick. Proc. Am. Acad. Arts Sci. **58**, 555 (1923).
[3] С.Н. Журков, В.И. Веттегрень, И.И. Новак, К.Н. Кашинкова. ДАН СССР **3**, 623 (1967).
[4] W. Thomson (Lord Kelvin). Mathematical and physical papers. Cambridge Univ. Press, London (1890). V. 3. P. 63.
[5] А.И. Слуцкер, В.Л. Гиляров, А.С. Лукьяненко. ФТТ **48**, 1832 (2006).
[6] В.Л. Гиляров, А.И. Слуцкер. ФТТ **52**, 540 (2010).
[7] А.И. Слуцкер, В.Б. Кулик. ФТТ **56**, 380 (2014).
[8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1974). 750 с.
[9] Р. Фейнман, А. Хиббс. Квантовая механика и интегралы по траекториям. Мир, М. (1968). 382 с.