01;05

ДИНАМИКА КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

© *В.Л.Попов*

1. Многие твердые (а также жидкие) материалы, используемые на практике, имеют кристаллическую или другую упорядоченную структуру. Деформация этой упорядоченной структуры всегда приводит к возникновению дополнительной (упругой) энергии. Что же касается движения структуры, то оно отнюдь не обязано определять кинетическую энергию системы. Перенос массы может осуществляться в упорядоченной структуре не только за счет ее деформирования, но и путем "просачивания" вещества сквозь остающуюся неподвижной структуру. Это явление в принципе неустранимо в жидких кристаллах ввиду большой "размытости" периодической структуры и подвижности молекул [1,§43,46].

Аналогичное явление возможно и в твердых телах, где оно связано с диффузией дефектов [1,§22]. Так если вектор $\mathbf{u}$ представляет собой смещение узлов решетки, то отождествление производной $\dot{\mathbf{u}}$ со скоростью $\mathbf{v}$ точек среды отнюдь не является чем-то само собой разумеющимся. Скорость $\mathbf{v}$ определяется в механике сплошных сред как импульс единицы массы вещества. Равенство $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}}$ справедливо, строго говоря, лишь для идеальных кристаллов, где в каждом узле решетки (и только в них) находится по атому. Если же кристалл содержит дефекты, то перенос массы относительно решетки (т. е. отличный от нуля импульс) может существовать и в недеформированной решетке за счет диффузии дефектов "сквозь решетку".

Еще более важную роль играет такое "просачивание" вещества сквозь решетку в квантовых кристаллах. Особенность квантовых кристаллов, как известно [2], состоит в том, что, благодаря большой амплитуде вероятности туннелирования, атомы, составляющие квантовый кристалл, не локализованы в узлах решетки. Это приводит к тому, что число атомов в квантовом кристалле, вообще говоря, не совпадает с числом узлов решетки, а движение кристаллической решетки не тождественно фактическому движению атомов материала. В частности, движение кристаллической решетки квантового кристалла (фактически представляющей собой волну модуляции вероятности нахождения частиц в той или иной точке пространства), вообще говоря, никак не связано с переносом массы вещества и соответственно с отличным от нуля импульсом. Эта ситуация сходна с той, которая имеет место в жидких кристаллах, где возможно движение "массы вещества" относительно остающейся неподвижно геликоидальной (или иной) структуры [1]. Отличие квантовых и жидких кристаллов состоит лишь в том, что в квантовых кристаллах такое движение вещества относительно решетки может протекать при $T = 0\,\mathrm{K}$ бездиссипативно.

Очевидно, что уравнения движения обычных упругих сред, предполагающие однозначную связь между скоростью движения элементов структуры $\mathbf{u}$ и импульсом, неприменимы для описания названных выше систем. Для их адекватного описания необходимо в явном виде учесть возможность движения вещества относительно "решетки". Проще всего это сделать на примере квантовых кристаллов, где при $T = 0\,\mathrm{K}$ названное движение протекает бездиссипативно и, следовательно, описание может быть построено на основе лагранжева подхода. Именно поэтому объектом данного исследования выбраны квантовые кристаллы. Его результаты, однако, имеют более широкую область применимости.

Прикладное значение этого анализа связано с тем, что движение вещества относительно решетки является одним из механизмов макроскопического деформирования материалов, причем, вообще говоря, отличным от таких известных и широко обсуждаемых механизмов, как пластическая деформация и диффузия точечных дефектов.

Хорошо известно, что длинноволновая динамика обычной упругой среды не зависит от ее детального внутреннего строения и определяется исключительно макроскопической симметрией среды по отношению к поворотам и трансляциям среды как целого [1]. В настоящем сообщении мы покажем, как на основе аналогичных соображений симметрии может быть построена макроскопическая динамика квантовых кристаллов.

2. Обозначим через $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ вектор смещения точки с начальной координатой $\mathbf{x}$ из положения равновесия. Свойство симметрии обычного упругого тела по отношнию к поворотам и трансляциям может быть сформулировано как требование инвариантности лагранжиана упругого тела при преобразованиях

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} + \mathbf{b}, \tag{1}$$

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} + [\delta\Omega, x], \tag{2}$$

где векторы переноса $\mathbf{b}$ и поворота Ω не зависят от координат и от времени. Инвариантность по отношению к преобразованиям (1) и (2) приводит к известному виду лагранжиана упругого тела, в случае изотропной среды[1] имеющего вид [1]

$$L_{el} = \int dV \left\{ \frac{1}{2}\rho \dot{u}_i \dot{u}_i - \frac{\lambda}{2}\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\mu}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right\}. \tag{3}$$

Здесь ρ — плотность среды, λ и μ — коэффициенты Ламе, dV — элемент объема; под повторяющимися индексами подразумевается суммирование.

3. С точки зрения симметрии отличие квантовых кристаллов от классических состоит в том, что в преобразовании (1) вектор $\mathbf{b}$ может, оставаясь постоянным как функция координат, изменяться во времени. Это обстоятельство связано с тем, что, как было отмечено выше, движение решетки квантового кристалла как таковое не является макроскопичсеки наблюдаемым процессом, поскольку не приводит к изменению кинетической энергии системы.

Для построения лагранжиана квантового кристалла нам, следовательно, необходимо построить лагранжиан, инвариантный к преобразованию

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} + \mathbf{b}(t); \tag{4}$$

где $\mathbf{b}(t)$ — произвольная функция времени. Построение лагранжиана, инвариантного к расширенной группе симметрии, может быть произведено с помощью введения калибровочного поля [3]. Для этого вместо обычных производных $\partial \mathbf{u}/\partial t$ введем так называемые ковариантные производные

$$\partial \mathbf{u}/\partial t \to D\mathbf{u} = \partial \mathbf{u}/\partial t - \mathbf{v}, \tag{5}$$

где закон преобразования поля $\mathbf{v}$, носящего название компенсирующего (или калибровочного), выбирается таким образом, чтобы производная $D\mathbf{u}$ была инвариантна к преобразованию (4). Легко убедиться в том, что преобразование

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \partial \mathbf{b}/\partial t \tag{6}$$

обеспечивает такую инвариантность. Формально введенное калибровочное поле $\mathbf{v}$ имеет смысл средней скорости туннельного движения вещества в квантовом кристалле.

[1] Отличие макроскопической симметрии кристалла от симметрии изотропного тела не имеет принципиального значения для целей данной статьи. Везде ниже кристалл в отношении своих упругих свойств рассматривается как изотропная среда. Обобщение на случай конкретной кристаллической симметрии не представляет труда и только внесло бы ненужные усложнения в изложение основной идеи.

Для получения полного лагранжиана квантового кристалла мы должны добавить к лагранжиану (3), в котором произведена замена (5), дополнительный лагранжиан, построенный из поля **v** и инвариантный к преобразованию (6). Имея ввиду длинноволновую динамику кристалла и ограничиваясь только членами низшего (второго) порядка по пространственным производным, можно показать, что единственным квадратичным инвариантом калибровочной группы является

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \qquad (7)$$

Таким образом, для лагранжиана упругого квантового кристалла получаем следующее выражение

$$L_{\text{quant}} = \int dV \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2}\rho(\dot{\mathbf{u}}-\mathbf{v})^2 - \frac{\lambda}{2}\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\mu}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) + \\ + \frac{B}{2}\frac{\partial v_i}{\partial x_j}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \end{array} \right\}. \qquad (8)$$

Здесь B — новая феноменологическая константа, характеризующая, наряду с параметрами ρ, λ и μ, свойства квантовой среды.

Варьируя интеграл действия с лагранжианом (8), найдем следующие динамические уравнения системы:

$$\begin{gathered} \rho(\ddot{\mathbf{u}} - \dot{\mathbf{v}}) - (\lambda+\mu)\nabla \operatorname{div}\mathbf{u} - \mu\Delta\mathbf{u} = 0, \\ 2\rho(\dot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}) + B\Delta\mathbf{v} = 0 \end{gathered} \qquad (9)$$

и граничные условия (для тела со свободной поверхностью):

$$\begin{gathered} \sigma_{ij}n_j = 0, \\ \frac{\partial v_i}{\partial x_j}n_j = 0, \end{gathered} \qquad (10)$$

где σ_{ij} — тензор упругих напряжений в среде, определяемый обычным законом Гука:

$$\sigma_{ij} = \lambda\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right). \qquad (11)$$

Подстановка в (9) решений в виде гармонических плоских волн и решение получающихся характеристических уравнений приводит к следующим законам дисперсии рассматриваемой среды:

$$\omega_1^2 = \tilde{\omega}_1^2 + c_{\parallel}^2 k^2 \qquad (12)$$

для продольных колебаний ($\mathbf{u} \parallel \mathbf{k}$, $\mathbf{v} \parallel \mathbf{k}$, где $\mathbf{k}$ — волновой вектор) и

$$\omega_1^2 = \tilde{\omega}_1^2 + c_\perp^2 k^2 \tag{13}$$

для поперечных колебаний ($\mathbf{u} \perp \mathbf{k}, \mathbf{v} \perp \mathbf{k}$). В (12) и (13)

$$\tilde{\omega}_1 = \sqrt{\frac{\lambda + \mu}{B}}, \qquad \tilde{\omega}_2 = \sqrt{\frac{\mu}{B}} \tag{14}$$

— граничные частоты спектра, а $c_\parallel$ и $c_\perp$ — соответственно скорости продольного и поперечного звуков в упругом континууме:

$$c_\parallel = \sqrt{\frac{\lambda + \mu}{\rho}}, \qquad c_\perp = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \tag{15}$$

Очевидно, что при частотах $\omega \gg \tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2$ спектр квантового кристалла имеет линейный вид и асимптотически совпадает со спектром нормальных колебаний обычной упругой среды. При частотах, сравнимых с $\tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2$, спектр отклоняется от линейного, а при $\omega < \tilde{\omega}_1$ и $\omega < \tilde{\omega}_2$ оказывается невозможным распространение (соответственно продольных и поперечных) возбуждений в среде. При $\omega = 0$ волновой вектор любых возбуждений (как поперечных, так и продольных) является чисто мнимой величиной

$$k = i\sqrt{\rho/B}. \tag{16}$$

Это означает, что квазистатические деформации проникают внутрь квантового кристалла только на глубину

$$l \approx l/\mathrm{Im}(k) = \sqrt{B/\rho}, \tag{17}$$

т. е. имеет место своего рода скин-эффект.

4. Допустим теперь, что движение вещества относительно решетки сопровождается диссипацией энергии. При слабой диссипации ее влияние может быть учтено с помощью диссипативной функции

$$R = \int \frac{1}{2} \alpha \mathbf{v}^2 dV. \tag{18}$$

Уравнения движения с учетом диссипации имеют вид

$$\begin{gathered} \rho(\ddot{\mathbf{u}} - \dot{\mathbf{v}}) - (\lambda + \mu)\nabla \operatorname{div} \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} = 0, \\ \rho(\ddot{\mathbf{u}} - \dot{\mathbf{v}}) + B\Delta \dot{\mathbf{v}} - \alpha \mathbf{v} = 0. \end{gathered} \tag{19}$$

Как и в бездиссипативном случае, все движения среды, описываемой уравнениями (19), распадаются на независимые "продольные" ($c\,\mathrm{rot}\,\mathbf{u} = 0$) и "поперечные" ($c\,\mathrm{div}\,\mathbf{u} = 0$). Для определенности рассмотрим ниже поперечные движения среды. Дисперсионное уравнение системы (19) в этом случае имеет вид

$$iB\rho k^2\omega^3 - \alpha\rho\omega^2 - iB\mu k^4\omega + \alpha\mu k^2 + i\omega\rho\mu k^2 = 0. \tag{20}$$

Нетрудно убедиться, что оно приводит к следующим асимптотикам закона дисперсии при $k \to 0$ и при $k \to \infty$:

$$\omega = c_\perp k - i\gamma k^2 \text{ при } k \to 0, \tag{21}$$

$$\omega = c_\perp k - i\frac{\kappa}{k^4} \text{ при } k \to \infty, \tag{22}$$

где

$$\gamma = \frac{\mu}{2\alpha}, \tag{23}$$

$$\kappa = \frac{\alpha\rho}{2B^2}. \tag{24}$$

Из (21) и (22) следует важный вывод: слабо затухающие возбуждения с законом дисперсии $\omega = c_\perp k$ имеются в квантовом кристалле при наличии диссипации как в длинноволновом, так и в коротковолновом пределах, и только в промежуточной области имеет место сильное отклонение от линейного закона дисперсии, сопровождаемое интенсивным затуханием. Другими словами, в обоих пределах квантовый кристалл ведет себя как обычная упругая среда, и только в определенном промежуточном диапазоне частот существенную роль начинает играть движение вещества относительно кристаллической решетки.

Как уже указывалось в начале статьи, описанные эффекты неспецифичны для квантовых кристаллов и в принципе могут играть существенную роль также при динамических нагружениях других сред (жидких и обычных кристаллов).

Список литературы

[1] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1987. § 43, 46.

[2] *Косевич А.М.* Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наук. думка, 1981.

[3] *Yang C.N., Mills R.L.* // Phys. Rev. 1954. V. 96. P. 191.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
Томск

Поступило в Редакцию 20 марта 1996 г.