Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 3, 124—130 (1988)

УДК 530

# ДИНАМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ КВАЗИГАРМОНИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

А. О. МЕЛИКЯН, С. М. СААКЯН

Институт физических исследований АН АрмССР

(Поступила в редакцию 30 мая 1987 г.)

Дается динамическое обоснование квазигармонического приближения для одномерной модели. Показано, что из всех степеней свободы можно выделить одну — адиабатическую динамическую переменную — аналог среднего расстояния между частицами в квазигармоническом приближении. Даны области применимости этого приближения.

## 1. Введение

Одним из распространенных методов исследования ангармонических эффектов в кристаллах является квазигармоническое приближение [1, 2]. Его смысл заключается в следующем. Вводится постоянная решетки $a$, зависящая от температуры $T$. Задание $a(T)$ однозначно описывает структуру кристалла в зависимости от температуры. В гармоническом приближении собственные частоты решетки $\omega_j$ не зависят от $a$. Если в разложении потенциальной энергии члены выше второго порядка отброшены, часть ангармонических эффектов все же описывается зависимостью $\omega_j(a)$. В этом приближении, называемом квазигармоническим, можно вычислить свободную энергию $F(a, T)$. Минимизируя $F$ по $a$ при заданной температуре $T$, определяют равновесное значение $a$ из условия

$$\left(\frac{\partial F}{\partial a}\right)_T = 0. \tag{1}$$

Такой подход имеет следующие недостатки. Во-первых, каждое стационарное состояние имеет свое квантово-среднее расстояние между частицами, и частота будет зависеть от этого среднего расстояния, а не от статистически средней величины $a$. Во-вторых, описанный выше подход не позволяет оценивать пределы применимости квазигармонического приближения.

В настоящей работе мы покажем, как можно получить квазигармоническое приближение из рассмотрения динамики одномерной системы частиц, взаимодействующих ангармонически.

## 2. Среднее расстояние между частицами как адиабатическая переменная

Рассмотрим одномерную цепочку $(N+1)$ частиц с взаимодействием ближайших соседей. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = -\sum_{i=1}^{N+1} \frac{1}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i=1}^{N} U(x_{i+1} - x_i), \tag{2}$$

где $x_i$ — координата, $m_i$ — масса $i$-частицы, $U$ — потенциал взаимодействия. Для удобства изложения примем $m_{N+1} = m_1 = m_i/2$, $m_i = 1$, $i = 2, \cdots, N$.

Разложим потенциальную энергию не в окрестности минимума, а в окрестности некоторой точки $\Delta$:

$$\sum_{i=1}^{N} U(x_{i+1} - x_i) = NU(\Delta) + \dot{U}(\Delta)(x_{N+1} - x_1 - N\Delta) +$$
$$+ \frac{1}{2} \ddot{U}(\Delta) \sum_{i=1}^{N} (x_{i+1} - x_i - \Delta)^2 + \cdots. \tag{3}$$

Теперь если мы определим $\Delta$ как

$$\Delta = \frac{1}{N} (x_{N+1} - x_1), \tag{4}$$

то $\Delta$ становится динамической переменной, имеющей смысл длины цепочки, приходящейся на одну частицу, так как $(x_{N+1} - x_1)$ есть длина цепочки. Кроме того, линейный член в (3) обращается в нуль.

Не зависящую от $\Delta$ величину обозначим через $y_1$,

$$y_1 = \frac{1}{2} (x_{N+1} + x_1).$$

В новых переменных гамильтониан (2) с учетом (3) примет вид

$$H = -\frac{1}{N^2} \frac{\partial^2}{\partial \Delta^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{N} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + NU(\Delta) +$$
$$+ \frac{1}{2} \ddot{U}(\Delta) \left[ \sum_{2}^{N-1} (x_{i+1} - x_i - \Delta)^2 + \left( y_1 - \frac{N}{2} \Delta - x_2 \right) + \right.$$
$$\left. + \left( y_1 + \frac{N}{2} \Delta - x_N \right)^2 \right] + \cdots. \tag{5}$$

Дальнейшие рассуждения аналогичны рассуждениям при разделении «медленной» и «быстрой» подсистем (МП и БП) в приближении Борна—Оппенгеймера (адиабатическое приближение) [2], с той разницей, что роль малого параметра, по которому происходит разделение, у нас играет $1/N$ вместо отношения масс легкой и тяжелой частиц.

Волновую функцию ищем в виде

$$\Psi(x_i) = \Psi(x_i, y_1, \Delta) = \sum_n \psi_n(\Delta) \varphi_n(x_i, y_1, \Delta), \tag{6}$$

где $\varphi_n(x_i, y_1, \Delta)$ — собственная функция БП, удовлетворяющая уравнению Шредингера для БП

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{N} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} \ddot{U}(\Delta) \left[ \sum_{2}^{N-1} (x_{i+1} - x_i - \Delta)^2 + \right. \right.$$

$$+\left(y_1-\frac{N}{2}\Delta-x_2\right)^2+\left(y_1+\frac{N}{2}\Delta-x_N\right)^2\Bigg]+\cdots-\varepsilon_n(\Delta)\Bigg\}\varphi_n(x_i, y_1, \Delta)=0. \tag{7}$$

Здесь $\varepsilon_n(\Delta)$ — спектр БП, зависящий от $\Delta$ как от параметра, а система уравнений для определения $\psi_n(\Delta)$ и спектра $E$ всей системы имеет вид

$$\left(-\frac{1}{N^2}\frac{\partial^2}{\partial\Delta^2}+NU(\Delta)+\varepsilon_n(\Delta)-E\right)\psi_n+\sum C_{nn'}\psi_{n'}=0, \tag{8}$$

где $C_{nn'}$ есть оператор неадиабатичности:

$$C_{nn'}=\frac{1}{N^2}\left(\int dy_1\prod_i dx_i\,\varphi_n^*\frac{\partial\varphi_{n'}}{\partial\Delta}\right)\frac{\partial}{\partial\Delta}+$$

$$+\frac{1}{2N^2}\int dy\prod_i dx_i\,\varphi_n^*\frac{\partial^2\varphi_{n'}}{\partial\Delta^2}. \tag{9}$$

### 3. Волновые функции БП

В (7) $\Delta$ входит как параметр, поэтому с помощью преобразования, зависящего от $\Delta$, можно перейти к нормальным координатам БП. Введем обозначения

$$y_i=x_i-\left(i-\frac{N+1}{2}\right)\Delta,\ i=2,\cdots N. \tag{10}$$

Тогда (7) примет вид

$$\left[-\frac{1}{2}\sum_1^N\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{1}{2}\ddot{U}(\Delta)\sum_1^N(y_{i+1}-y_i)^2+\cdots-\varepsilon_n(\Delta)\right]\varphi_n=0 \tag{11}$$

с граничным условием $y_{N+1}=y_1$, которое следует из определения $y_1$ и $\Delta$.

Перейдя к нормальным координатам, получим

$$\left[-\frac{1}{2}\sum_k\left(\frac{\partial^2}{\partial q_k^2}-\omega_k^2(\Delta)\,q_k^2\right)+\cdots-\varepsilon_n(\Delta)\right]\varphi_n=0, \tag{12}$$

где

$$\omega_k^2(\Delta)=4\,\ddot{U}(\Delta)\sin^2\frac{\pi k}{N}, \tag{13}$$

$$q_k=\sqrt{\frac{\omega_k}{N}}\,y_1\left(\cos\frac{2\pi k}{N}+\sin\frac{2\pi k}{N}\right)+$$

$$+\sqrt{\frac{\omega_k}{N}}\sum_{i=2}^N x_i\left(\cos\frac{2\pi ki}{N}+\sin\frac{2\pi ki}{N}\right)+a_k\Delta, \tag{14}$$

$$a_k=\sqrt{\omega_k N}\left(\sin\frac{\pi k}{N}-\cos\frac{\pi k}{N}\right)\operatorname{ctg}\frac{\pi k}{N}. \tag{15}$$

Уравнение (12) описывает систему невзаимодействующих осцилляторов с частотами $\omega_k$, зависящими от $\Delta$ (если в (12) пренебречь производными потенциала высшего порядка). Спектр $\varepsilon_n$ тогда есть $\sum_k\omega_k(\Delta)\,(n_k+1/2)$, $\varphi_n$ — произведение осцилляторных волновых функций.

## 4. Вычисление статсуммы

Для нахождения спектра всей системы вернемся к уравнениям (8). Роль потенциала здесь играет функция $NU(\Delta)+\sum\omega_k(\Delta)(n_k+1/2)$. Разложим эту функцию в окрестности ее минимума $\bar{\Delta}$ (см. Приложение) и ограничимся квадратичным членом. Тогда $E$ будет иметь вид

$$E(n_k,\alpha)=NU(\bar{\Delta})+\sum\omega_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)+\Omega(\bar{\Delta})\left(\alpha+\frac{1}{2}\right), \tag{16}$$

где

$$\Omega(\bar{\Delta})=\frac{1}{N}\sqrt{N\ddot{U}(\bar{\Delta})+\sum\ddot{\omega}_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)},$$

а $\bar{\Delta}$ определяется из условия минимума

$$N\dot{U}(\Delta)+\sum\dot{\omega}_k(\Delta)\left(n_k+\frac{1}{2}\right)=0. \tag{17}$$

Как видно из (17), $\bar{\Delta}$ зависит от набора квантовых чисел $\{n_k\}$ БП.

Статсумма $Z$ по определению равна

$$Z=\sum_{n_k,\alpha}\exp\left\{-\beta\left[NU(\bar{\Delta})+\sum\omega_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)+\Omega(\bar{\Delta})\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)\right]\right\}.$$

Суммирование по состояниям МП, т. е. по $\alpha$, проводится очевидным образом:

$$Z=\sum_{\{n_k\}}\frac{\exp\left\{-\beta\left[NU(\bar{\Delta})+\sum\omega_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)\right]\right\}}{2\,\mathrm{sh}\,\frac{\beta\Omega_k(\bar{\Delta})}{2}}. \tag{18}$$

Так как $\Omega(\bar{\Delta})\sim N^{-1/2}$, можно разложить $\mathrm{sh}\,\beta\Omega/2$ в ряд и ограничиться первым членом:

$$Z=\sum_{\{n_k\}}\frac{N}{2\beta}\frac{\exp\left\{-\beta\left[NU(\bar{\Delta})+\sum\omega_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)\right]\right\}}{\sqrt{N\ddot{U}(\bar{\Delta})+\sum_k\ddot{\omega}_k(\bar{\Delta})\left(n_k+\frac{1}{2}\right)}}. \tag{19}$$

Легко заметить, что выражение, стоящее под знаком суммы в (19), с учетом условия (17) есть просто интеграл

$$\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int d\Delta\exp\left\{-N\beta\left[U(\Delta)+\frac{1}{N}\sum\omega_k(\Delta)\left(n_k+\frac{1}{2}\right)\right]\right\},$$

взятый методом перевала. Следовательно,

$$Z=N\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\sum_{n_k}\int d\Delta\exp\left\{-\beta N\left[U(\Delta)+\frac{1}{N}\sum\omega_k(\Delta)\left(n_k+\frac{1}{2}\right)\right]\right\},$$

где $\Delta$ есть переменная интегрирования, не зависящая от $\{n_k\}$, т. е. ввиду линейности по $n_k$ показателя экспоненты подынтегральное выражение легко суммируется по $n_k$:

$$Z = N\frac{\beta}{\pi}\int d\Delta \exp\left\{-\beta N\left[U(\Delta) + \frac{1}{N\beta}\sum_{k}\ln 2\mathrm{sh}\frac{\beta\omega_k}{2}\right]\right\}.$$

Интеграл по $\Delta$ берется методом перевала.

Уравнение

$$\dot{U}(\Delta) + \frac{1}{N}\sum \dot{\omega}_k(\Delta)\,\mathrm{ctg}\,\frac{\beta\omega_k(\Delta)}{2} = 0 \tag{20}$$

для нахождения перевальной точки $\Delta_0$ дает нам уравнение состояния (1) квазигармонического приближения.

Окончательно для статсуммы имеем

$$Y = A\exp\left\{-\beta N\left[U(\Delta_0) + \frac{1}{N\beta}\sum_{k}\ln 2\mathrm{sh}\frac{\beta\omega_k(\Delta_0)}{2}\right]\right\}, \tag{21}$$

а свободная энергия

$$F = N\left[U(\Delta_0) + \frac{1}{\beta N}\sum\ln 2\mathrm{sh}\frac{\beta\omega_k(\Delta_0)}{2}\right]$$

тоже совпадает со свободной энергией, найденной в квазигармоническом приближении.

## 5. Поправки за счет неадиабатичности

Оценим сделанное приближение. $q_k$ зависит от $\Delta$ явно через преобразование (14) и неявно через зависимость $\omega_k$ от $\Delta$. При вычислении матричных элементов оператора неадиабатичности мы будем отбрасывать $\partial\omega_k/\partial\Delta$, так как этот член, кроме всего прочего, пропорционален ангармонизму и дает лишнюю малость. Тогда

$$\frac{\partial\varphi_n}{\partial\Delta} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_k\left(\sqrt{n_k}\,\varphi_{n_k-1} - \sqrt{n_k+1}\,\varphi_{n_k+1}\right)a_k\prod_{k'\neq k}\varphi_{n_{k'}},$$

$$\frac{\partial^2\varphi_n}{\partial\Delta^2} = \frac{1}{2}\sum_{k,k'}\left(\sqrt{n_k}\,\varphi_{n_k-1} - \sqrt{n_{k+1}}\,\varphi_{n_k+1}\right)\left(\sqrt{n_{k'}}\,\varphi_{n_{k'}-1} -\right.$$

$$\left.-\sqrt{n_{k'}+1}\,\varphi_{n_{k'}+1}\right)a_k a_{k'}\prod_{k''\neq k,k'}\varphi_{n_{k''}} + \frac{1}{2}\sum_k\left(\sqrt{n_k(n_k-1)}\,\varphi_{n_k-2} -\right.$$

$$\left.-(n_k+1)\,\varphi_{n_k} + \sqrt{(n_k+1)(n_k+2)}\,\varphi_{n_k}\right)a_k^2\prod_{k'\neq k}\varphi_{n_{k'}}. \tag{22}$$

Следовательно, диагональный матричный элемент оператора неадиабатичности пропорционален $a_k^2/N^2$. Значит при не очень малых $k$ поправки к энергии первого порядка пропорциональны $N^{-1}$. Поправка второго порядка есть

$$E^{(2)}_{n_k,\alpha} = \sum_{n_k,\alpha}\frac{|C^{\alpha\alpha'}_{nn'}|^2}{E_{n'\alpha'} - E_{n\alpha}}. \tag{23}$$

Опять при не очень малых $k$ наименьший член в $E_{n\alpha}$ есть $\Omega \sim N^{-1/2}$. Следовательно, наименьший знаменатель будет в случае, когда $\{n_k\} = \{n_{k'}\}$ и $\alpha' = \alpha \pm 1$; тогда $E^{(2)} \sim N^{-3/2}$.

При малых $k$, во-первых, $a_k \sim N$ и, во-вторых, $\omega_k \sim N^{-1}$, что приводит к расходимости ряда в (23). Это является следствием одномерности модели. В трехмерном случае плотность состояний для низких мод пропорциональна $k^2$ и малые $k$ дают конечный вклад в суммы теории возмущений.

Кроме того, поскольку функция $NU(\Delta) + \sum \omega_k(\Delta)(n_k + 1/2)$ имеет $s$-образный вид (см. Приложение), при достаточно низком горбе этой функции возможен туннельный переход в область непрерывного спектра, т. е. большие значения чисел заполнения $\{n_k\}$ БП, понижающие горб указанной функции, также лежат за пределами нашего приближения.

### 6. Приложение

Покажем, что для характерных потенциалов взаимодействия в кристаллах, изображенных на рис. 1, функция $NU + \sum_k \omega_k (n_k + 1/2)$ имеет $s$-образный вид, изображенный на рис. 2. Уравнение для нахождения экстремумов функции $U + 1/N \sum_k \omega_k (n_k + 1/2)$ есть

$$\dot{U} + \frac{1}{N} \sum_k \dot{\omega}_k \left( n_k + \frac{1}{2} \right) = 0. \tag{24}$$

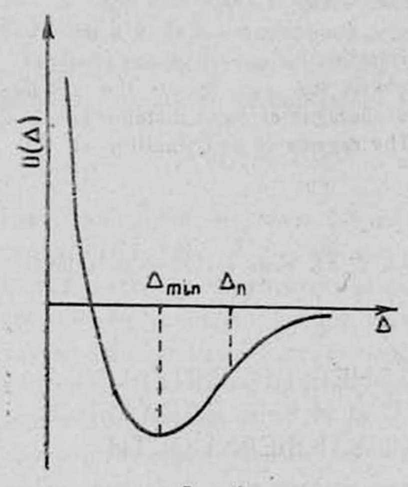


Рис. 1.

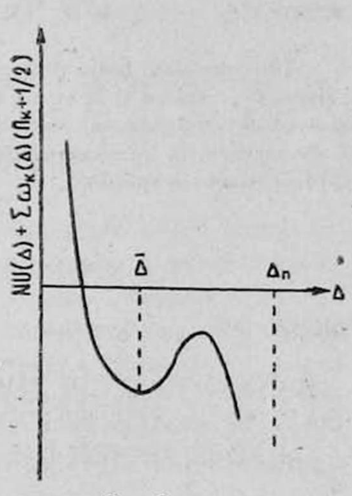


Рис. 2.

В случае близкодействия (24) можно переписать в виде

$$\dot{U} + \Gamma \frac{\dddot{U}}{\ddot{U}} = 0, \tag{25}$$

где $\Gamma = (1/N) \sum_k (n_k + 1/2) \sin 2\pi k/N$. Если $\Gamma$ достаточно мала, один корень (25) лежит в окрестности точки минимума $U$, так как $\dddot{U} < 0$, если $\Delta < \Delta_n$, где $\Delta_n$—точка перегиба $U$. Другой корень лежит в окрестности $\Delta_n$, т. е. там $\dot{U}$ принимает свое максимальное значение в этой точек, а $\ddot{U}$ в окрестности $\Delta_n$ стремится к нулю, увеличивая второй член в (25).


## ЛИТЕРАТУРА

1. *Лейбфрид Г., Людвиг В.* Теория ангармонических эффектов в кристаллах. Изд. ИЛ, М., 1963.
2. *Борн М., Хуан-Кунь.* Динамическая теория кристаллических решеток. Изд. ИЛ, М., 1958.


## ՔՎԱԶԻՀԱՐՄՈՆԻԿ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅԱՆ ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ՀԻՄՆԱՎՈՐՈՒՄԸ


Ա. Հ. ՄԵԼԻՔՅԱՆ, Ս. Մ. ՍԱՀԱԿՅԱՆ



*Աշխատանքում, միաչափ մոդելի համար, տրվում է քվազիհարմոնիկ մոտավորության դինամիկական հիմնավորումը։ Ցույց է տրված, որ բոլոր հնարավոր ազատության աստիճաններից կարելի է առանձնացնել մեկը՝ ադիաբատիկ դինամիկական փոփոխական, որը հանդիսանում է մասնիկների միջև միջին հեռավորությամբ քվազիհարմոնիկ մոտավորության դեպքում։ Բացի դրանից բերվում է քվազիհարմոնիկ մոտավորության կիրառելիության սահմանները։*


## DYNAMICAL BASIS OE QUASI-HARMONIC APPROXIMATION


A. O. MELIKYAN, S. M. SAAKYAN



The dynamical basis of quasi-harmonic approximation for one-dimensional model is given. It is shown that of all the degrees of freedom one can select the single one — adiabatic dynamical variable, — which is the analogue of mean distance between the particles in quasi-harmonic approximation. The regions of applicability of thi approximation are specified.



Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 3, 130—136 (1988)

УДК 530.145


# ВАКУУМНЫЕ СРЕДНИЕ ТЕНЗОРА ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ВНУТРИ И ВНЕ ИДЕАЛЬНО ПРОВОДЯЩЕЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ


А. А. СААРЯН

Институт прикладных проблем физики АН АрмССР



(Поступила в редакцию 5 июня 1987 г.)



Вычислены перенормированные вакуумные средние тензора энергии-импульса электромагнитного поля внутри и вне идеально проводящей цилиндрической поверхности. Регуляризация проведена с помощью обобщенной формулы Абеля—Плана. Показано, что компаненты вакуумного тензора энергии-импульса удовлетворяют уравнению непрерывности. Приведены результаты численных расчетов этих величин.


1. Эффект Казимира является одним из простых примеров зависимости свойств вакуума квантованного поля от многообразия, на котором рассмат-