

Анализ особенностей энергетических спектров возбужденных состояний в области их пересечения на основе точно решаемой квантовомеханической задачи

Д. Ю. Черкасов

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

E-mail: dre21@yandex.ru

Статья поступила 24.12.2011, подписана в печать 18.04.2012

Видоизменение структуры спектров возбужденных состояний квантовой системы, связанное с пересечением (или сближением) их энергий и выявленное на основе точно решаемой квантовомеханической задачи, проиллюстрировано на примере модельного представления Ландау о взаимно независимом характере фонон-ротонных возбужденных состояний в вырожденном жидким гелием-II.

Ключевые слова: фонон-ротонная модель Ландау, вырожденный ${}^4\text{He}$, спектр возбуждений вырожденного ${}^4\text{He}$.

УДК: 530.145. PACS: 03.65.-w.

Введение

Проводимые в последнее время исследования биологических систем радио- и фотометрическими методами выявили в многоатомных структурах устойчивые и характерные для каждого вещества коллективные движения ядер типа осцилляций, которые оказывают влияние, в частности, на перенос электронов и возбужденные состояния, возникающие в результате фотосинтеза и т.д. [4, 5]. В простейшем варианте эти колебания сопоставляются с параболическими зависимостями энергий возбужденных состояний от импульса. Однако, как оказалось, минимальные точки этих парабол располагаются достаточно близко друг от друга, они уже в нижних своих частях начинают пересекаться и независимость как бы «гармонических» колебаний друг от друга фактически не реализуется [4, 5]. Более того, согласно квантово-механическим представлениям, пересечение энергетических спектров нереализуемо, так как при сближении энергий разных ветвей возбужденных состояний возникает общее волновое поле, которое раздвигает эти ветви, не доводя их до пересечения и создавая общую огибающую всего набора пересекающихся параболических энергетических ям, характеризующих данную систему.

Ниже этот процесс перестройки характера возбужденных состояний рассмотрен на примере точно решаемой квантово-механической задачи о пересечении только двух энергетических ветвей. Конкретный выбор этих ветвей был совмещен ради наглядности с исторической задачей, аппроксимирующей на феноменологическом уровне особенности спектра возбужденных состояний жидкого He^4 [6, 9]. Оказалось, что плавный переход одного типа возбуждений в другой реализуется не всегда. При определенных параметрах их резонансного взаимодействия в области сближения энергетических спектров возникает их зубчатая структура, которая в аналогичной ситуации в биологических системах может провоцировать усиление упомянутых выше процессов переноса электронов в возбужденные состояния системы.

1. Постановка задачи

В известной работе 1941 г. Л. Д. Ландау [6] предложил для лучшего описания динамических и термодинамических свойств жидкого гелия добавить к акустической ветви его возбужденных состояний с энергией, линейно зависящей от импульса p (c — скорость звука в гелии):

$$E(p) = pc, \quad (1)$$

независимую от нее ветвь так называемых ротонных возбуждений, отделенных от основного состояния энергетической щелью Δ и имеющих квадратичную по импульсу зависимость энергии

$$\omega(p) = \Delta + \frac{p^2}{2M}$$

(два подгоночных параметра — Δ и M). Эта ветвь ассоциировалась с вихревыми возбуждениями, обнаруженными к тому времени в жидким гелием (т. е. несущими определенный момент количества движения, откуда и их название — «ротоны»). Она воспроизводила идею борновских возбуждений (тоже в основном крутильных) в твердом теле, приподнятых в энергетическом отношении над акустическими ветвями возбужденных состояний.

После появления микроскопической теории слабонеидеального бозе-газа Н. Н. Боголюбова [7, 8], выявившей существенное влияние конденсатного состояния бозе-системы на формирование ее возбужденных состояний, Ландау [3, 9] вынужден был изменить первоначальную конструкцию возбужденных состояний. Боголюбов показал, что в неидеальном бозе-газе нет двух различных ветвей возбужденных состояний, а имеется единственная дисперсионная кривая зависимости от импульса энергии возбужденных состояний системы $\mathcal{E}(p)$, которая при малых значениях импульса p соответствует акустическим колебаниям (фононам), при средних значениях образует своеобразный «ротонный» провал, а при $p \rightarrow \infty$ выходит на уровень энергии

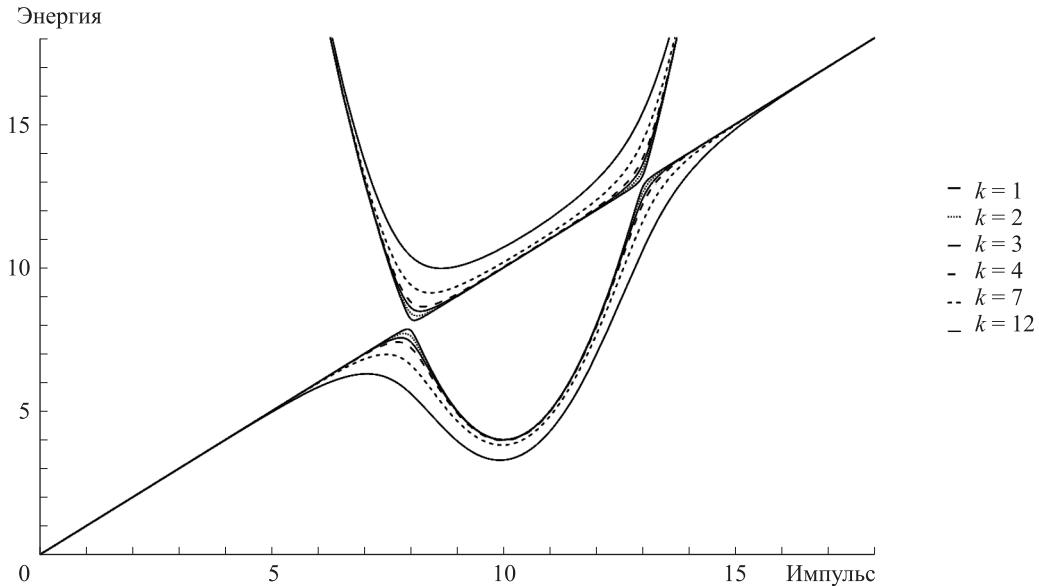


Рис. 1. Коррекция модельного спектра возбужденных состояний в вырожденном ${}^4\text{He}$

одночастичных возбуждений

$$E_p = \frac{p^2}{2m}.$$

Ландау сдвинул ротонный минимум от точки $p = 0$ вправо на величину p_0 (рис. 1)

$$e_{\text{rot}} = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2M}, \quad (2)$$

добавив в свою схему, кроме величин Δ и M , третий подгоночный параметр p_0 и сохранив полную независимость возбуждений типа фононов и типа новых ротонов, скорректировал первоначальный расчет термодинамических свойств введенной им феноменологической модели [2].

В первоначальном варианте 1941 г. ротонные возбуждения несли определенный момент количества движения, и в случае сближения соответствующего им спектра (2) с энергетическим спектром фононов (1), не несущих момент количества движения, переходы между этими состояниями были запрещены, и эти возбуждения оставались независимыми друг от друга, несмотря на возможное пересечение их энергетических спектров. Чтобы соответствовать результатам микроскопической теории Боголюбова, в модели Ландау 1947 г. оба вида возбуждений пришлось объединить, так что с ростом импульса в области «ротонной ямы» ничего уже закрутиться не могло. В расчетах термодинамических свойств системы, характеризуемой возбужденными состояниями типа (1) и (2), Ландау исходил из взаимной независимости этих возбуждений. Однако после снятия запретов на фонон-ротонные переходы становится обязательным учет того взаимно-резонансного влияния этих возбужденных состояний друг на друга, которое оказывается существенным в области близкого совпадения их энергий (т.е. совпадения их частот). С помощью регулярных методов квантовой механики (типа теории возмущений) вследствие возникающих расходимостей описать этот процесс перестройки энергетических спектров в обла-

сти их сближения в принципе невозможно. Поэтому в следующем пункте проблема перестройки энергетической структуры феноменологической фонон-ротонной модели (1) и (2) будет исследована на основе точного решения соответствующей квантовомеханической задачи.

2. Перестройка первоначально заданных энергетических спектров возбужденных состояний системы

Положим, что в рассматриваемой бозе-системе имеются два типа возбужденных состояний, соответствующих формулам (1) и (2), причем параметры Δ , M и p_0 такие, что ротонная парабола $w(p)$ пересекает фононную прямую $E(p)$ при значениях импульса p_1 и p_2 , определяемых равенством

$$E(p_i) = w(p_i), \quad i = 1, 2.$$

Вблизи этих значений вследствие возрастающих резонансных явлений становятся возможными переходы между изначальными фононными состояниями, характеризуемыми операторами рождения и уничтожения ξ_p^+ и ξ_p , и ротонными состояниями, характеризуемыми операторами η_p^+ и η_p . Сохраняя принятый стиль модельного рассмотрения, положим, что в результате возникающих в области резонанса квантовых переходов «размножение» числа ветвей возбужденных состояний не происходит. Пренебрежем также реально существующими диссипативными процессами, связанными с взаимодействием статической системы с термостатом. Тогда гамильтониан такой системы (без затухания) можно представить в виде

$$H = \sum_p E(p) \xi_p^+ \xi_p + \sum_p w(p) \eta_p^+ \eta_p + \sum_p \lambda(p) (\xi_p^+ \eta_p + \eta_p^+ \xi_p),$$

где $\lambda(p)$ — некоторая амплитуда этих возможных переходов, существенная в области пересечения исходных спектров. В микроскопической теории неидеального бозе-газа с парным взаимодействием частиц друг с другом подобная структура эффективного гамильтониана

возникает из исходного в результате использования идеи приближенного вторичного квантования (см. подробнее [1]) с соответствующими микроскопическому подходу величинами $E(p)$, $w(p)$ и $\lambda(p)$. Формальное же решение уравнения Шрёдингера для системы, характеризуемой выписанным выше квадратичным гамильтонианом с любыми значениями величин E , w и λ , полученное с помощью соответствующего поворота в плосковолновом базисе или, что проще, с помощью метода двухвременных температурных функций Грина (см. [1]), сводим к исследованию соответствующих двух независимых друг от друга идеальных бозе-систем возбужденных состояний (каждое из которых представляет суперпозицию исходных ξ - и η -возбуждений), характеризуемых новыми операторами рождения и уничтожения a - и b -типов

$$H = \sum_p \mathcal{E}_1(p) a_p^+ a_p + \sum_p \mathcal{E}_2(p) b_p^+ b_p$$

и непересекающимися энергетическими ветвями возбужденных состояний

$$\mathcal{E}_{1,2} = \frac{E(p) + w(p)}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{[E(p) - w(p)]^2 + 4\lambda(p)^2}.$$

При этом спектр $\mathcal{E}_1(p)$ оказывается всегда ниже $\mathcal{E}_2(p)$, в точках пересечения исходных спектров p_i ($i = 1, 2$) величина расхождения нижней ветви $\mathcal{E}_1(p_i)$ от верхней $\mathcal{E}_2(p_i)$ составляет величину

$$\mathcal{E}_i(p_i) = E(p_i) \mp \lambda(p_i),$$

а при любых значениях импульса

$$\mathcal{E}_1(p) + \mathcal{E}_2(p) = E(p) + w(p).$$

В случае рассматриваемой модельной системы Ландау величины $E(p)$ и $w(p)$ уже заданы изначально формулами (1) и (2). При моделировании фактора $\lambda(p)$ нужно учесть, что он существен в основном в области $E(p) \sim w(p)$, в которой резко усиливаются интерференционные явления волновых функций, характеризующих исходные возбуждения ξ - и η -типов. В результате этого происходит перестройка общего квантового состояния

системы, приводящая к формированию уже независимых друг от друга суперпозиционных возбужденных состояний a - и b -типов. Использование с самого начала модельных представлений в структуре спектров $E(p)$ и $w(p)$ дает право на моделирование и величины $\lambda(p)$. При этом естественнее всего воспользоваться соображениями релеевской теории колебаний и смоделировать форму $\lambda(p)$ в виде резонансного максимума в области совпадения части исходных возбуждений (1) и (2):

$$\lambda_1(p) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{[E(p) - w(p)]^2 + \Gamma^2} = \frac{\gamma}{\pi^2 [E(p) - w(p)]^2 + \gamma^2}.$$

А для того чтобы при расчетах можно было одновременно увеличивать высоту и ширину этого «единичного» максимума в k раз, сохраняя его форму, надо окончательно положить

$$\lambda_k(p) = \frac{k^3 \gamma}{\pi^2 [E(p) - w(p)]^2 + k^2 \gamma^2}.$$

При проведении численных расчетов целесообразно ради их упрощения ввести условные единицы и положить $\Delta = 4$, $2M = 1$, $p_0 = 10$, $c = 1$, $\gamma = 5$. Тогда

$$E(p) = p, \quad w(p) = 4 + (p - 10)^2, \quad p_1 = 8, \quad p_2 = 13,$$

$$\mathcal{E}_{1,2}(p) = \frac{1}{2} \left\{ p^2 - 19p + 104 \mp \right. \\ \left. \mp \sqrt{(p^2 - 21p + 104)^2 + \left(\frac{10k^3}{\pi^2(p^2 - 21p + 104)^2 + 25k^2} \right)^2} \right\}.$$

Сопоставляя эти целочисленные значения параметров с реальными величинами, характерными для реального жидкого гелия-II [10, 11], имеем в самом грубом приближении для импульсных величин (рис. 1 — масштаб по горизонтали): $p_0 \sim 2 \text{ \AA}^{-1}$ (десять условных единиц). Для энергетических величин (рис. 1 — масштаб по вертикали): $\Delta \sim 10 \text{ K}$ (четыре условные единицы), $E(p) \sim 20 \text{ K}$ (восемь условных единиц).

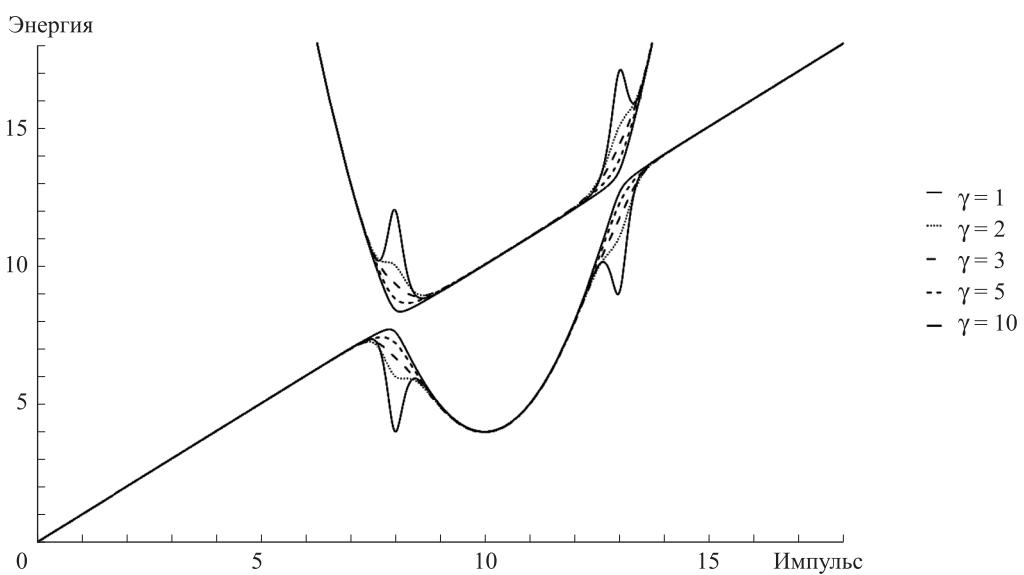


Рис. 2. Модельный спектр возбужденных состояний для различных γ при $k = 4$

Заключение

Численный расчет зависящих от импульса величин $\mathcal{E}_1(p)$ и $\mathcal{E}_2(p)$ для случаев $k = 1, 2, 3, 4, 7$ и 12 привел к результатам, представленным на рис. 1. Оказалось, что нижняя ветвь возбужденных состояний $\mathcal{E}_1(p)$ с характерной горбатостью в диапазоне импульсов от 5 до 12 условных единиц качественно соответствует результату боголюбовской теории 1946 г. [3, 7], а при интенсивности фактора «взаимопревращения» $\lambda(p)$, соответствующей значению $k = 12$, напоминает (но только в области $0 \leq p \leq 12$) экспериментальные результаты, впервые полученные Хеншоу и Вудсом в 1961 г. [10, 11]. Именно это обстоятельство позволяет подогнать параметры модели Ландау Δ , p_0 , и M под реальное по отношению к Не-II характерное для него поведение величины $\mathcal{E}_1(p)$ (ветвь $\mathcal{E}_2(p)$ при этом должна оставаться без внимания).

По отношению к исходной модели Ландау (соответствующей $\lambda(p) = 0$) произошли заметные изменения. На примере кривой $k = 12$: точка минимума ротонной ямы сдвинулась влево, $\tilde{p} \simeq 0.99p_0 = 9.9$, величины энергетического порога Δ уменьшились, $\tilde{\Delta} \simeq 0.8\Delta$, а величина, характеризующая крутизну параболической ямы M , увеличилась более чем в два раза. Отделившаяся от $\mathcal{E}_1(p)$ верхняя часть спектра $\mathcal{E}_2(p)$ поднялась на высоту $\tilde{\Delta} \simeq 9.96$ (вместо исходных четырех) с координатой $\tilde{p}_0 \simeq 8.58$ (т. е. имеет порядок более 20 К), превратившись в энергетически недосягаемый «супер-ротон». В связи со всеми этими изменениями в предпринятом Ландау расчете термодинамических свойств фонон-ротонной модели [2] необходима соответствующая коррекция, впрочем, почти не затрагивающая основной части результатов, связанной с учетом только низкоэнергетической (при температуре ниже 2 К) фононной части энергетического спектра $\mathcal{E}_1(p)$ возбужденных состояний системы.

На окончательный вид зависимостей от импульса модифицируемых энергий $\mathcal{E}_1(p)$ и $\mathcal{E}_2(p)$ влияет их первоначальная структура $E(p)$ и $w(p)$, которая может отличаться от рассмотренной, а величина и форма «разведения» последних при подходе к точкам их пересечения существенно определяется выбором функции $\lambda(p)$. В связи с этим стоит отметить, что бого-

любовоподобная форма функции $\mathcal{E}_1(p)$ возникает при достаточной величине фактора γ (рис. 2). В частности, при, казалось бы, естественном для любого расчета выборе величин $\gamma = 1$ и $k = 1$ зависимость энергии от импульса в точках $p = 8$ и $p = 13$ имеет более сложную зубчатую форму, не свойственную реально наблюдаемому в гелии-II участку возбужденных состояний (часто называемых «максонами») и переходящую в ожидаемую плавную зависимость только при достаточно больших значениях γ (начиная с $\gamma = 5$ и более). «Зубчатый» же вариант поведения спектров в области их сближения по энергиям (см. рис. 2) может составить интерес, как уже отмечалось во введении, при интерпретации явлений, связанных с «пересечением» осцилляционных процессов в многоатомных биологических структурах. Отметим при этом, что выявленные особенности поведения энергий $\mathcal{E}_i(p)$ возбужденных состояний системы определяются в основном видом функций $E(p)$ и $w(p)$ в областях, примыкающих к точкам их пересечения, т. е., грубо говоря, областью пересечения двух прямых $E(p) = E(p_i) + a(p - p_i) + \dots$, $w(p) = w(p_i) + b(p - p_i) + \dots$, что придает полученным в этой области результатам достаточно общий характер по отношению к различным вариантам выбора исходных функций $E(p)$ и $w(p)$.

Автор выражает признательность профессорам И. А. Квасникову и Ф. В. Шугаеву за предоставленную тему для исследования и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Квасников И.А. Квантовая статистика. М., 2011.
2. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 2. М., 2002.
3. Ширков Д.В. // Н. Н. Боголюбов — математик, механик, физик. Изд 2-е / Под ред. А. Н. Сисакяна и Д. В. Ширкова. Дубна, 2009.
4. Yakovlev A.G. // Biochemistry. 2002. N 41. P. 2667.
5. Яковлев А.Г. // Биохимия. 2003. № 68. С. 664.
6. Ландау Л.Д. // ЖЭТФ. 1941. II. С. 592.
7. Боголюбов Н.Н. // J. Phys. USSR. 1947. N 11. P. 23.
8. Боголюбов Н.Н. // Изв. АН СССР. 1947. № 11(1). С. 77.
9. Landau L.D. // J. Phys. USSR. 1947. N 11. P. 91.
10. Henshaw D.G., Woods A.D.B. // Phys. Rev. 1961. **121**. P. 1266.
11. Glyde H.R. // Low Temperature Phys. 1992. N 87. P. 407.

Analysis of the characteristics of the energy spectra of excited states in the region of their intersection on the basis of an exactly solvable quantum mechanical problem

D. Yu. Cherkasov

Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

E-mail: dre21@yandex.ru.

Modifying the structure of the spectra of the excited states of a quantum system associated with the intersection (or convergence) of their energies and detected on the basis of an exactly solvable quantum mechanical problem, illustrated by the Landau model representation of the mutually independent nature of the phonon-roton excited states in the dilute liquid helium-II.

Keywords: phonon-roton Landau model, dilute ${}^4\text{He}$, spectrum of excitations of dilute ${}^4\text{He}$.

PACS: 03.65.-w.

Received 24 December 2011.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 4(2012).

Сведения об авторе

Черкасов Дмитрий Юрьевич — студент; e-mail: dre21@yandex.ru.