

П-757  
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 7789

ПРИЕЗЖЕВ Вячеслав Борисович

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ  
В КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОСТИ

Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Дубна 1974

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики  
Объединённого института ядерных исследований

Научный руководитель:  
старший научный сотрудник  
кандидат физико-математических наук Н.М. ПЛАКИДА.

Официальные оппоненты  
доктор физико-математических наук А.В. СВИДЗИНСКИЙ,  
кандидат физико-математических наук Ю.А. ЦЕРКОВНИКОВ.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:  
Киевский Государственный университет им. Т.Г. Шевченко.

Автореферат разослан " " \_\_\_\_\_ 1974 г.  
Защита диссертации состоится " " \_\_\_\_\_ 1974 года  
на заседании Учёного Совета Лаборатории теоретической физики

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ

Учёный секретарь Совета

Р.А. АСАНОВ

4 - 7789

ПРИЕЗЖЕВ Вячеслав Борисович

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ  
В КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОСТИ

Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Объединённый институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Картина атомного движения представляется чрезвычайно сложной даже в случае так называемых простых классических жидкостей. Первым существенным шагом в изучении динамики атомов жидкости явилась идея о разделении теплового движения на колебательное и диффузионное<sup>/1/</sup>. Было установлено, что характерное время диффузионных процессов на порядок превосходит характерный период колебательного движения. Это даёт возможность, по крайней мере, для качественных оценок, рассматривать оба движения независимо друг от друга. Дальнейшее развитие динамической теории жидкости было связано с экспериментами по рассеянию тепловых нейтронов<sup>/2/</sup>. Наиболее неожиданным результатом этих экспериментов было обнаружение эффекта коллективизации колебательного движения, т.е. существования в классической жидкости, несмотря на отсутствие кристаллической симметрии, коллективных возбуждений типа фононов - квазифононов.

Теоретическое описание этого эффекта, в соответствии с идеей о независимости колебательного и диффузионного движения, началось с изучения моделей, в которых диффузия вообще не учитывалась<sup>/2-10/</sup>. В этих моделях жидкость уподобляется аморфному твёрдому телу и жидкостной характер системы проявляется лишь в разупорядоченности фиксированных положений равновесия колеблющихся атомов. Модели такого типа принято называть квазикристаллическими. Формально, результаты исследований квазикристаллических моделей сводятся к следующей схеме<sup>/5,8/</sup>.

Пусть  $\vec{u}(n)$  - вектор смещения атома модельной системы, локализованного в положении равновесия  $n$ . В гармоническом приближении уравнение движения для фурье-компоненты по времени от этой величины имеет вид

$$M \omega^2 u_\alpha(n) - \sum_{m \neq n} \Phi_{nm}^{\alpha\beta} \{u_\beta(n) - u_\beta(m)\} = 0, \quad (I)$$

где  $M$  - масса атома, а  $\Phi_{nm}^{\alpha\beta}$  - матрица силовых постоянных для данной модельной системы. Уравнение (1) может быть записано в символических обозначениях  $(M\omega^2 - \Phi)u = 0$  или, если ввести динамическую матрицу,  $\mathcal{D} = \Phi/M$ , в виде

$$(\omega^2 - \mathcal{D})u = 0. \quad (2)$$

Фононная функция Грина  $g(\omega)$  модельной системы определяется равенством

$$g(\omega) = (\omega^2 - \mathcal{D})^{-1} \quad (3)$$

и зависит от данной конфигурации положений равновесия  $\{n\}$ . Для нахождения фононных частот в квазикристаллической модели необходимо найти функцию Грина  $\langle g(\omega) \rangle$ , усреднённую по конфигурациям или, что одно и то же, найти динамическую матрицу  $\mathcal{D}$ , определённую равенством

$$\langle g(\omega) \rangle = (\omega^2 - \mathcal{D})^{-1}. \quad (4)$$

Простейшее приближение для среднего значения функции Грина (3) можно выразить приближённым равенством

$$\mathcal{D} = \langle \mathcal{D} \rangle. \quad (5)$$

Описанная процедура усреднения иногда называется квазикристаллическим приближением. Несмотря на свою простоту, это приближение правильно схватывает качественные особенности коллективных возбуждений жидкости типа фононов и, в частности, правильно воспроизводит зависимость частоты этих возбуждений от волнового числа. При построении количественной теории возникают трудности, часть которых перечислена ниже.

1. Учёт ангармонизма. Одночастичная функция Грина модельной системы вычисляется из уравнения (1), т.е. в гармоническом приближении. В совокупности с приближением (5) это приводит к бесконечному времени жизни возбуждений. В то же время известно, что в реальных жидкостях затухание коллективных возбуждений значительно, особенно при температурах, заметно превышающих температуру плавления. Пренебрежение ангармоническими эффектами, помимо невозможности рассмотреть затухание квазифононов, имеет ещё тот недостаток, что при этом не учитывается сдвиг частот, приводящий, как правило, к существенному изменению формы дисперсионных кривых. Из динамической теории кристаллов известно, что возможны даже такие ситуации (например, в случае квантовых кристаллов), когда пренебрежение ангармонизмом приводит к чисто мнимым решениям для фононных частот. Поэтому представляется важным последовательно учесть ангармонические эффекты при рассмотрении динамики жидкости в квазикристаллическом приближении.

2. Влияние диффузии. Как уже отмечалось, в квазикристаллической модели жидкость уподобляется аморфному твёрдому телу и влияние диффузии атомов на коллективное движение не рассматривается. Такое приближение, по-видимому, хорошо выполняется в области высоких частот квазифононов, когда характерное время диффузионных процессов на 1-2 порядка превышает характерное время колебаний. Однако при рассмотрении низкочастотных возбуждений это условие уже не выполняется. Интуитивно ясно, что низкочастотные возбуждения испытывают сильное влияние диффузионных процессов и учёт последних в этом случае обязателен.

3. Процедура усреднения. При учёте только парных сил взаимодействия между атомами системы матрица силовых постоянных

$\Phi_{nm}^{\alpha\beta}$  зависит от пары координат положений равновесия колеблющихся атомов  $n$  и  $m$ . Поэтому при вычислении среднего значения динамической матрицы необходимо знать парную функцию распределения положений равновесия атомов  $G(n-m)$  в модельной системе. Поскольку задача вычисления функции  $G(r)$  на основе измеряемых характеристик системы является довольно сложной, часто прибегают к приближённой замене этой функции парной функцией распределения  $g(r)$ . В случае систем с реальным потенциалом (особенно квантовых жидкостей) такая замена является неудовлетворительной из-за существования больших нулевых колебаний, так как в этом случае функции  $g$  и  $G$  могут значительно отличаться друг от друга.

4. Проблема квантовой жидкости. Рассмотрение квазикристаллической модели показывает, что зависимость частоты коллективных колебаний от волнового числа, получаемая в этой модели, имеет тот же вид, что и фононная дисперсионная кривая в жидком гелии. Возникает вопрос, можно ли использовать квазикристаллическую модель для количественного описания фононов в жидком гелии, или более конкретно: может ли энергия основного состояния квантовой жидкости достигать минимума на множестве волновых функций квазикристаллического типа, будет ли значение минимума энергии соответствовать экспериментально измеряемому и, наконец, дадут ли расчёты с минимализирующей волновой функцией и реальным межатомным потенциалом правильный ход дисперсионной зависимости в жидком гелии? Вопрос о применимости модельного подхода к проблеме коллективных возбуждений в жидком гелии является актуальным потому, что последовательное микроскопическое рассмотрение системы взаимодействующих бозонов проведено только для случая слабо неидеального бозе-газа<sup>/II/</sup>.

5. Улучшение квазикристаллического приближения. Из формул (3) и (4) следует, что приближение (5) приводит в гармоническом приближении к чисто действительным значениям динамической матрицы  $\mathcal{D}$  и, следовательно, к коллективным возбуждениям без затухания. В то же время ясно, что даже в гармоническом случае возбуждения типа фононов должны иметь конечное время жизни из-за неупорядоченности системы. Поэтому необходимым шагом на пути развития квазикристаллической модели жидкости является выход за рамки приближения (5) и учёт всей совокупности факторов, определяющих конечное время жизни возбуждений: ангармонизма, самодиффузии, разупорядоченности системы.

Настоящая диссертация посвящена изучению квазикристаллической модели простой жидкости и частичному решению первых четырёх из перечисленных проблем, возникающих в связи с использованием этой модели.

Диссертация состоит из четырёх глав.

В первой главе дан краткий обзор литературы по рассматриваемому в работе кругу вопросов и сформулированы проблемы, изучаемые в диссертации.

Во второй главе дана формулировка квазикристаллической модели для описания квазифононов в простой классической жидкости. В § 2 гамильтониан системы записывается в терминах операторов, аналогичных операторам рождения и уничтожения фононов в кристалле. В § 3 написаны уравнения для функций Грина от введённых операторов. Вычисление квазифононных функций Грина проводится в псевдогармоническом приближении<sup>/12/</sup>, позволяющем учесть влияние ангармонизма межатомного потенциала на частоту квазифононов. В результате такого подхода возникает самосогласованная система уравнений, определяющая квазифононные частоты и корреляционные

функции типа смещения— смещение. В § 4 приведены результаты решения этой системы уравнений для аргона при  $T = 85.9^{\circ}$  т.е. при температуре, близкой к температуре плавления. Получена дисперсионная зависимость частоты коллективных возбуждений от волнового числа, которая в пределах экспериментальных ошибок согласуется с измеренной<sup>/13/</sup> методом неупругого рассеяния тепловых нейтронов. Таким образом, в главе II показано, как может быть преодолена первая из отмеченных трудностей квазикристаллической модели — учёт ангармонических эффектов.

Описанная выше модель может быть названа стационарной, так как в ней положения равновесия колеблющихся атомов полагаются фиксированными. В третьей главе рассматривается обобщение квазикристаллической модели, а именно, её нестационарный вариант, когда положения равновесия атомов зависят от времени и медленно меняются с характерным временем диффузионных процессов  $\tau_D$ . Нестационарная квазикристаллическая модель позволяет учесть влияние самодиффузии на частоту и время жизни квазифононов, что особенно существенно вблизи так называемой переходной области, в которой частота квазифононов становится порядка  $1/\tau_D$ . В § I обсуждаются трудности определения коллективных возбуждений в переходной области и необходимость учёта самодиффузии при вычислении динамического структурного фактора  $S(\vec{k}, \omega)$  вблизи этой области. В § 2 написано общее выражение для  $S(\vec{k}, \omega)$  через функцию отклика системы на внешнее возмущение. В § 3 предложена релаксационная модель для вычисления  $S(\vec{k}, \omega)$  с учётом самодиффузии. При формулировке этой модели используется тот факт, что в нестационарной квазикристаллической модели положения равновесия колеблющихся атомов зависят от времени и, следовательно, среда, окружающая выделенный атом, релаксирует

к своему равновесному распределению при перемещении этого атома. Релаксация среды обуславливает, в свою очередь, зависимость от времени эффективного потенциала, образованного частицами, окружающими выделенный атом, что в конечном счёте приводит к затуханию колебательного движения.

Исследование временной эволюции  $\rho_1(r, t)$  — функции распределения частиц, окружающих выделенный атом, проводится с помощью кинетического уравнения, написанного в § 4. Решение этого уравнения позволяет выразить  $\rho_1(r, t)$  через автокорреляционную функцию  $g_2(r, t)$ , имеющую простой физический смысл. Если известна функция распределения  $\rho_1(r, t)$ , задача определения квазифононных частот может быть переформулирована как эффективная одночастичная задача. Решение её проводится в § 5. Результатом гл. III является получение выражения для  $S(\vec{k}, \omega)$  с учётом самодиффузии, определяющего зависимость частоты и времени жизни коллективных возбуждений от волнового числа. В частности, из полученного выражения для  $S(\vec{k}, \omega)$  следует, что время жизни квазифононов уменьшается по мере приближения их частоты и волнового числа к переходной области. Этот физически разумный результат находится в противоречии с результатами нестационарной квазикристаллической модели без учёта релаксации<sup>/10/</sup> и указывает на ограниченную применимость последней модели вблизи переходной области. Результаты численных расчётов функции для аргона при  $T = 85.9^{\circ}\text{K}$  приведены в § 6. Полученная зависимость времени жизни квазифононов от волнового числа является новой и нуждается в экспериментальном подтверждении.

В четвёртой главе квазикристаллическая модель используется для изучения жидкого гелия ( $\text{He}^4$ ) при  $T = 0$ . Глава состоит из двух частей. В первой части анализируется сама возможность

применения квазикристаллического подхода к изучению свойств гелия в основном состоянии. Для этой цели волновая функция основного состояния жидкого гелия  $\Psi_0$  записывается в виде симметризованного произведения локализованных одночастичных волновых функций  $\varphi(r)$ , умноженного на джастровский фактор  $f(r)$  /14/, учитывающий отталкивающую часть межатомного взаимодействия

$$\Psi_0 = \sum_{P_e} \prod_i \varphi(\vec{R}_i - \vec{r}_e) \prod_{i < j} f(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (6)$$

где  $P_e$  - оператор перестановки частиц; суммирование проводится по всем перестановкам. Совокупность классических координат  $\{R_i\}$  является здесь квантовым аналогом набора фиксированных положений равновесия в квазикристаллической модели. Проверка возможности применения модели заключается в установлении того факта, что на выбранном классе волновых функций  $\Psi_0$  достигается минимум энергии  $E_0$ , причём минимальное значение  $E_0$  достигается при конечной области локализации одночастичной волновой функции  $\varphi$ . Если это условие выполняется, то волновая функция  $\Psi_0$  принимает тот же вид, что и для квантового кристалла (за исключением кристаллической симметрии в расположении координат  $R_i$ ) и мы приходим к квантовому аналогу стационарной квазикристаллической модели.

В § 2 находятся выражения для среднего значения энергии  $E_0$  и парной корреляционной функции  $g(r)$  в основном состоянии с волновой функцией  $\Psi_0$ . Для этой цели используется кластерное разложение /15/ в том виде, в котором оно применяется в теории квантовых кристаллов /16/. В § 3 написано явное выражение для энергии основного состояния во втором порядке кластерного разложения. Выражения для  $E_0$  и  $g(r)$  позволяют искать волновую функцию  $\Psi_0$  вариационным способом. Вариационная

процедура для нахождения  $E_0$  описана в § 4. Особенностью этой процедуры является то, что минимум энергии ищется не на всём классе возможных функций  $\Psi_0$  вида (6), а только функций, удовлетворяющих условию равенства функции  $g(r)$  её истинному значению, которое предполагается известным из эксперимента /17/.

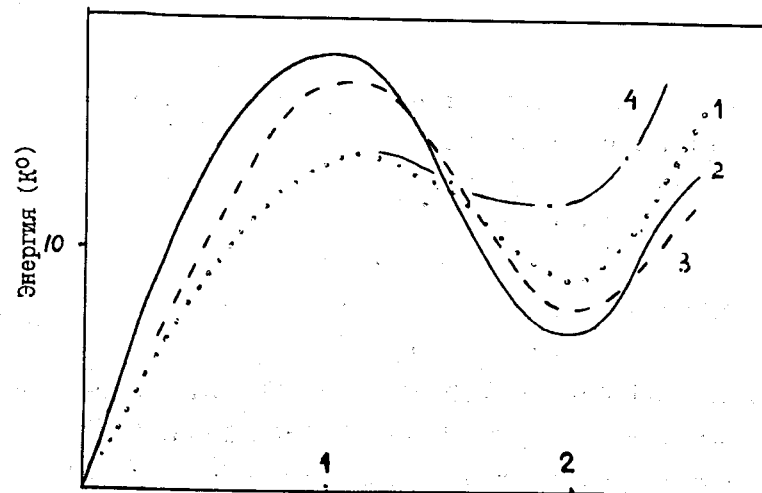
Результатом вычислений первой части гл. IV является нахождение явного вида волновой функции основного состояния  $\Psi_0$  модельной системы. Показано, что минимум энергии достигается при конечной ширине одночастичной волновой функции, что открывает возможность использования квазикристаллической модели для изучения динамически жидкого гелия при  $T = 0$ . Определена функция распределения средних значений координат  $G(r)$ , которая в квазикристаллическом подходе эквивалентна функции распределения положений равновесия колеблющихся атомов. Вычислена энергия основного состояния модельной системы, описываемой волновой функцией  $\Psi_0$ . Интересной особенностью полученного результата является то, что превышение вычисленной энергии над экспериментально измеренной составляет  $6^\circ \text{K}/\text{атом}$ , т.е. ту же величину, что и для квантового кристалла в том же порядке кластерного разложения.

Во второй части гл. IV результаты вычислений, выполненных в первой части используются для нахождения дисперсионной зависимости коллективных возбуждений в гелии при  $T = 0$ . При этом существенно то обстоятельство, что знание явного вида волновой функции  $\Psi_0$  позволяет обойтись без подгоночных параметров, а знание функции распределения  $G(r)$  позволяет произвести усреднение по ансамблю модельных систем именно с этой функцией, не прибегая к приближённой замене её парной функцией рас-

предела  $g(r)$ . Полученная дисперсионная кривая находится в хорошем согласии с экспериментальными данными (см. рис. 1).

Подводя итог проведённому исследованию квазикристаллической модели, можно сказать, что эта модель довольно точно отражает картину высокочастотного коллективного движения атомов не только в классической, но и в квантовой жидкости. После усовершенствования этой модели, проведённого в настоящей диссертации — учёта ангармонических эффектов, учёта релаксационного эффекта самодиффузии и последовательного проведения усреднения по ансамблю модельных систем, квазикристаллическая модель даёт хорошее количественное согласие с результатами экспериментального исследования коллективных возбуждений в жидкости.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах /5, 9, 18, 19, 20/.



Волновое число ( $\text{Å}^{-1}$ )

Дисперсионные кривые: 1 — эксперимент; 2 — данная работа;  
3 — /8/; 4 — /21/.



Литература:

1. Я.И. Френкель. Кинетическая теория жидкостей, М-Л, издательство АН СССР, 1945.
2. Thermal Neutron Scattering, edited by Egelstaff, Academic Press (London), 1965.
3. K.S.Singwi, Physica, 31,1257, 1965.
4. P.Schofield, SM-104/135, Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, 1968.
5. В.Б. Приезжев. Препринт ОИЯИ, Р4-4502, Дубна, 1969.
6. В.Б. Приезжев. Препринт ОИЯИ, Р4-5317, Дубна, 1970.
7. В.М. Сысоев. Письма в ЖЭТФ, 14, 289, 1971.
8. S.Takeno, M.Goda, Progr. of Theor. Phys. 47,790, 1972.
9. В.Б. Приезжев. Препринт ОИЯИ, Р4-7209, 1973.  
сборник "Физика жидкостей"; изд-во КГУ, 1974.
10. J.Hubbard, J.L. Beeby, J.Phys. C, ser 2,2,556,1968.
11. Н.Н. Боголюбов. Изв. АН СССР. сер. физ. II,77, 1947.
12. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. Препринт ОИЯИ, Р4-3449, Дубна, 1967; Acta Phys. Hung., 25, 17, 1968;  
Н.М. Плакида. "Метод двухвременных функций Грина в теории ангармонических кристаллов, в сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля", ФМЛ, М., 1973.
13. Y.Obata, JAERI 1157, Conference on Inelastic Neutron Scattering in Solids and Liquids, Tokai, 1967.
14. R.Jastrow. Phys. Rev. 98, 1479, 1955.
15. N.G.van Kampen, Physica, 27,783,1961.
16. L.H.Nosanow. Phys. Rev., 146,120,1966.
17. E.K.Achter, L.Mayer. Phys. Rev. 188, 291, 1969.
18. В.Б. Приезжев, Н.М. Плакида. XII международная конференция стран-членов СЭВ по физике и технике низких температур,

Секешфехрвар, 1973 г.

19. В.Б. Приезжев. Препринт ОИЯИ, Е4-5348, Дубна, 1970.  
Acta Phys. Pol., A 39, 401, 1971.
20. В.Б. Приезжев. Acta Phys. Pol., A45, 313, 1974; A45, 329, 1974.
21. R.P. Feynman. M. Cohen. Phys. Rev. 102,1189,1956.

Рукопись поступила в издательский отдел  
7 марта 1974 года.