

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 536.75

АНГАРМОНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

О. В. Кузьмина

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

Исследованы ангармонические эффекты для ориентационно разупорядоченных кристаллических систем двухатомных молекул. Полученные результаты используются при расчете температурных зависимостей постоянной решетки, коэффициента линейного расширения и изотермической сжимаемости γ -фазы молекулярного кислорода.

При изучении свойств высокотемпературных фаз кристаллов двухатомных молекул квантовые эффекты не являются определяющими [1–3]. Поэтому мы рассмотрим классическую систему N тождественных двухатомных молекул, занимающую объем V при температуре T . Отдельную молекулу опишем как жесткий ротатор массы M с моментом инерции I . Выберем парный межмолекулярный потенциал в виде

$$\Phi(r_{ij}) = A[(\sigma/r_{ij})^m - (\sigma/r_{ij})^n], \quad (1)$$

где A , σ , m , n — параметры, r_{ij} — расстояние между центрами масс молекул с номерами i и j .

Потенциальная энергия взаимодействия молекул определяется в этом случае соотношением

$$U_N(q_1, \dots, q_N) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|q_i - q_j|),$$

где q_i — радиус-вектор центра масс молекулы с номером i . Задача вычисления свободной энергии системы сводится к расчету конфигурационной части свободной энергии [4]:

$$F_Q = -\Theta \ln Q_N,$$

$$Q_N = [N!]^{-1} \int \exp[-U_N/\Theta] dq_1 \dots dq_N,$$

где $\Theta = kT$, k — постоянная Больцмана.

Пусть условная ячейка кристалла содержит неэквивалентные позиции s типов и N_ν — общее число частиц, расположенных в позициях ν -типа, индекс $\nu = \overline{1, s}$. Если $n_\nu = N_\nu/N$, то $\sum_{\nu=1}^s n_\nu = 1$.

В квазигармоническом приближении решение уравнения самосогласованного поля является точным и записывается в виде

$$\rho_1^\nu(x_j) = \frac{[\det(\Lambda_{\alpha\beta}^\nu)]^{1/2}}{(2\pi\Theta)^{3/2}} \exp \left[-\frac{1}{2\Theta} \sum_{\alpha\beta} \Lambda_{\alpha\beta}^\nu x_j^\alpha x_j^\beta \right],$$

$$\Lambda_{\alpha\beta}^\nu = \left(\frac{\partial^2 u^\nu(x_j)}{\partial x_j^\alpha \partial x_j^\beta} \right)_{x_j=0},$$

где $\rho_1^\nu(x_j)$ — унарная функция распределения для j -й частицы, движущейся в окрестности позиции ν -типа, $x_j = q - a_j^\nu$, индексы $\alpha, \beta = \overline{1, 3}$ нумеруют проекции векторов на оси координат, a_j^ν — радиус-вектор j -го узла ν -типа. Самосогласованный потенциал определяется как $u^\nu(x_j) = \sum_{i \neq j} \Phi(|x_j + a_j^\nu - a_i|)$. Диагонализируя матрицу $\Lambda_{\alpha\beta}^\nu$, приходим к соотношению

$$\rho_1^\nu = \prod_{\alpha=1}^3 \left([\lambda_\alpha^\nu / (2\pi\Theta)]^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2\Theta} \lambda_\alpha^\nu (y_j^\alpha)^2 \right] \right),$$

в котором λ_α^ν — собственные значения матрицы $\Lambda_{\alpha\beta}^\nu$.

Для конфигурационной части F_Q свободной энергии в квазигармоническом приближении имеем

$$f = F_Q/N = \sum_{\nu=1}^s n_\nu f^\nu, \quad (2)$$

$$f^\nu = -\frac{3}{2}\Theta \ln(2\pi\Theta) + \frac{1}{2}\Theta \sum_{\alpha=1}^3 \ln \lambda_\alpha^\nu + u_0^\nu,$$

где $u_0^\nu = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi(|a_i - a_j^\nu|)$ — статическая энергия решетки на одну молекулу в позиции ν -типа. Соотношение (2) позволяет определить давление p :

$$p = -\frac{a}{3v} \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right)_\Theta, \quad (3)$$

где a — параметр кубической ячейки.

В соответствии с симметрией кристаллической структуры γ -фазы кислорода O_2 имеем $\Lambda_{\alpha\beta}^\nu = 0$ при $\alpha \neq \beta$ и $\nu = \overline{1, 2}$. Величины λ_α^1 при $\alpha = \overline{1, 3}$ равны. Значения λ_α^2 удовлетворяют соотношению $\lambda_1^2 \neq \lambda_2^2 = \lambda_3^2$. Расстояние между ближайшими соседями для молекулы в позиции ν -типа равно $b_\nu = a/r_\nu$, где $r_1 = 4/\sqrt{5}$, $r_2 = 2$, а $n_1 = 1/4$, $n_2 = 3/4$.

Введем решеточные суммы

$$B_{m\alpha}^\nu = \left(\frac{m}{3} - 1\right)^{-1} \sum_{i \neq j} \frac{m(k_{i\alpha}^\nu)^2 - 1}{|l_i^\nu|^m},$$

$$C_m^\nu = \left(\frac{r_\nu}{r_1}\right)^m \sum_{i \neq j} \frac{1}{|l_i^\nu|^m}, \quad C_m = \sum_{\nu=1}^2 n_\nu C_m^\nu,$$

где $l_i^\nu = (a_i - a_j^\nu)/b_\nu$, $k_{i\alpha}^\nu = l_{i\alpha}^\nu/|l_i^\nu|$, $m > 3$. Кроме того, пусть $d(\alpha, \nu|m, n) = [r_\nu/r_1]^{m-n} \times [B_{(m+2)(\alpha)}^\nu/B_{(n+2)(\alpha)}^\nu]$. Тогда, используя выражения (1)–(3), получим

$$p = \frac{3RT}{w} \gamma - \frac{R}{w} \bar{A} C_n \frac{n x^{m-n} - m C_m / C_n}{6 x^m},$$

$$\gamma = \frac{1}{3} \sum_{\nu=1}^2 n_\nu \gamma^\nu,$$

$$\gamma^\nu = \frac{1}{6} \times \sum_{\alpha=1}^3 \frac{n(n-1)(n+2)x^{m-n} - m(m-1)(m+2)d(\alpha, \nu|m, n)}{n(n-1)x^{m-n} - m(m-1)d(\alpha, \nu|m, n)},$$

где $x = b_1/\sigma$, $\bar{A} = A/k$, w — молярный объем, R — универсальная газовая постоянная.

В случае выбора потенциала Ленарда-Джонса $A = 4\varepsilon$, $m = 12$, $n = 6$ и

$$p = \frac{3RT}{w} \gamma - \frac{R}{w} 4\bar{\varepsilon} C_6 \frac{x^6 - 2C_{12}/C_6}{x^{12}}, \quad (4)$$

$$\gamma^\nu = \frac{2}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{10x^6 - 77d(\alpha, \nu|12, 6)}{5x^6 - 22d(\alpha, \nu|12, 6)},$$

$$a = \sigma r_1 \left[4C_{12} / \left(C_6 + \sqrt{(C_6)^2 - 6C_{12}\gamma T / \bar{\varepsilon}} \right) \right]^{1/6}, \quad (5)$$

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon/k.$$

Для γ -фазы молекулярного кислорода теоретическая зависимость параметра a кубической ячейки от температуры T , рассчитанная по формулам (4)–(5) при давлении $p \approx 0$, хорошо согласуется с данными эксперимента [5] (соответственно кривая и точки на рис. 1). Температурные зависимости коэффициента линейного расширения $\eta(T) = a^{-1}(\partial a/\partial T)_p$ и изотермической сжимаемости $\chi(T) = w^{-1}(\partial w/\partial p)_T$ представлены на рис. 2 и 3

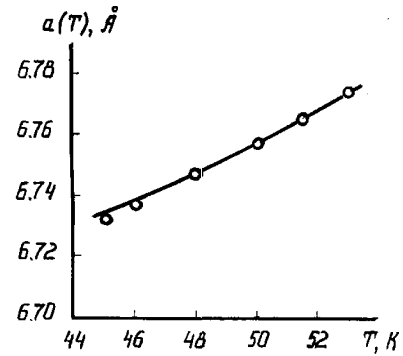


Рис. 1

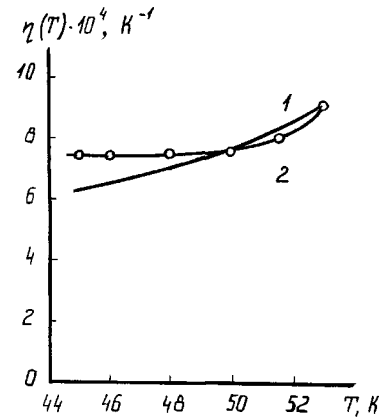


Рис. 2

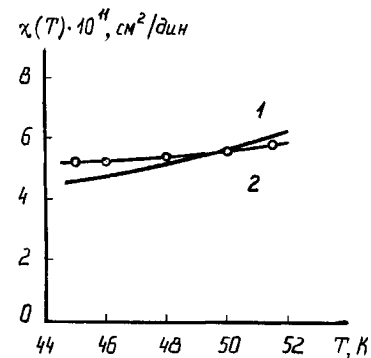


Рис. 3

(рассчитанные в настоящей работе кривые 1 и экспериментальные кривые 2 из работы [5]). Результаты теории находятся в хорошем согласии с опытными данными.

Следовательно, метод самосогласованного поля [6] позволяет с хорошей точностью описать ангармонические эффекты в кристаллических системах двухатомных молекул. Дальнейшее улучшение полученных в настоящей работе результатов связано с рассмотрением корреляций, квантовых эффектов и поправок, обусловленных анизотропией межмолекулярного взаимодействия.

Литература

1. Фрейман Ю.А. // Физ. низ. температур. 1990. **16**, № 8. С. 955.

2. Локтев В.М., Шарапов С.Г. // Физ. низ. температур. 2000. **26**, № 12. С. 1214.
 3. Локтев В.М. // Физ. низ. температур. 2000. **26**, № 12. С. 1256.
 4. Николаев П.Н., Соколов А.И., Кузьмина О.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 6. С. 6 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 6. P. 6).

5. Крупский И.Н., Прохвятилов А.И., Фрейман Ю.А., Эренбург А.И. // Физ. низ. температур. 1979. **5**, № 3. С. 271.
 6. Базаров И.П., Николаев П.Н. Теория систем многих частиц. М.: Изд-во МГУ, 1984.

Поступила в редакцию
23.05.01

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 538.56+535

ЭФФЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ШУМА В МОНОХРОМАТИЧЕСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ГЕНЕРАЦИЯ СЖАТЫХ СОСТОЯНИЙ В СРЕДАХ С КУБИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

Ю. Е. Дьяков

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Получено точное решение статистической задачи о прохождении смеси сигнала и шума через среду с кубической нелинейностью. Показано, что может иметь место эффективная (до 34%) перекачка энергии из шумовой компоненты излучения в монохроматическую. Найдено распределение степени сжатия шумового поля по длине нелинейной среды. Отмечена возможность сильного скачка сжатия в начале области распространения.

1. Распространение плоских шумовых волн в средах с кубической нелинейностью исследовалось в работах [1–4] на основе нелинейного уравнения для комплексной амплитуды A волны

$$\frac{\partial A}{\partial z} + \frac{1}{u} \frac{\partial A}{\partial t} + i\beta |A|^2 A = 0, \quad (1)$$

имеющего точное аналитическое решение

$$A(t, z) = A_0(\theta) \exp[-i\beta |A_0(\theta)|^2 z], \quad z \geq 0. \quad (2)$$

Здесь u — групповая скорость, β — коэффициент нелинейности ($\text{Im} \beta = 0$), $\theta = t - z/u$, $A_0(t) = A(t, z=0)$ — комплексная амплитуда входного поля (см., напр., [1, с. 615]).

Нас будет интересовать случай, когда функция A_0 в выражении (2) описывает аддитивную смесь регулярной монохроматической компоненты (сигнала) и случайной узкополосной компоненты (шума): $A_0 = \bar{A}_0 + \tilde{A}_0$. Ранее было показано, что при этом в нелинейной среде генерируется поле $A = \bar{A} + \tilde{A}$, шумовая компонента которого \tilde{A} может находиться в сжатом состоянии [2–4]. Однако из-за трудностей, возникающих при статистическом усреднении решения (2), эта задача рассматривалась методом возмущений, т.е. при малых A_0 и z .

2. В настоящей работе получены точные результаты, свободные от указанных ограничений. Это удалось сделать благодаря тому, что использовалась специальная модель флуктуаций \tilde{A}_0 , соответствующая

стационарному входному шуму с постоянной огибающей $\rho_0 = \text{const}$ и случайно меняющейся фазой $\varphi = \varphi(t)$, имеющей равномерное статистическое распределение

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \quad (-\pi \leq \varphi \leq \pi). \quad (3)$$

Такая модель приближенно описывает, например, шум на выходе генератора при большом превышении порога генерации ([1, с. 495]). Задавая входное поле в виде

$$E(t, z=0) = S_0 \cos(\omega_0 t + \varphi_0) + \rho_0 \sin(\omega_0 t - \varphi(t))$$

($S_0, \omega_0, \varphi_0, \rho_0 = \text{const}$), получим

$$\bar{A}_0 = S_0 e^{i\varphi_0} = \text{const}, \quad \tilde{A}(t) = -i\rho_0 e^{-i\varphi(t)},$$

так что

$$|A_0(\theta)|^2 = S_0^2 + \rho_0^2 - 2\rho_0 S_0 \sin[\varphi(\theta) + \varphi_0].$$

В результате выражение (2) принимает вид

$$A(z, t) = C_0 [S_0 - i\rho_0 \exp(-i(\varphi + \varphi_0))] \exp(ix \sin(\varphi + \varphi_0)), \quad (4)$$

где $\varphi = \varphi(\theta)$,

$$C_0 = \exp\{i[\varphi_0 - \beta z(S_0^2 + \rho_0^2)]\} = \text{const} \quad (|C_0| = 1),$$