

УДК 538.9+538.931

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-20-28

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ ЛЁГКОГО АТОМА (И ЕГО ИЗОТОПОВ) НА ЕГО ПЕРЕМЕЩЕНИЕ В ВИДЕ СОЛИТОНА ФРЕНКЕЛЯ-КОНТОРОВОЙ ПО АЛМАЗОПОДОБНОЙ РЕШЁТКЕ

Аскерова В. И., Калашников Е. В.

*Государственный университет просвещения
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация*

Аннотация

Цель: выяснить, как сочетание массы атома водорода и гелия (с учётом его изотопов) и его поляризуемости влияют на перемещение солитона Френкеля-Конторовой.

Процедура и методы. Используются соотношения (полученные авторами ранее), связывающие характеристики атома и характеристики решётки, через которую перемещается солитон.

Результаты. Обнаружена сильная взаимосвязь между массой атома и его поляризуемостью, которая определяет строение солитона.

Теоретическая и/или практическая значимость. Показано, что возможность перемещения солитона определяется и массой атома и его поляризуемостью вплоть до того, что из-за поляризуемости, например, атом гелия перемещаться не будет.

Ключевые слова: Солитон Френкеля-Конторовой, поляризуемость атома, массы изотопов водорода и гелия

EFFECT OF POLARIZABILITY OF A LIGHT ATOM (AND ITS ISOTOPES) ON ITS MOVEMENT IN THE FORM OF A FRENKEL-KONTOROVA SOLITON THROUGH A DIAMOND-LIKE LATTICE

V. Askerova, E. Kalashnikov¹

*State University of Education
ul. Very Voloshinoi 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation*

Abstract.

Aim. An attempt is made to find how the combination of the mass of an atom of hydrogen and helium (taking into account its isotopes) and its polarizability affect the movement of a Frenkel-Kontorova soliton.

Methodology. Use is made of the relations (previously obtained by the authors) to relate the characteristics of the atom with the characteristics of the lattice through which the soliton moves.

Results. A strong relationship is found between the mass of an atom and its polarizability, which determines the soliton structure.

Research implications. It is shown that the possibility of moving a soliton is determined by both the mass of the atom and its polarisability; for example, due to polarizability, a helium atom will not move.

Keywords: Frenkel-Kontorova soliton, atom polarizability, masses of hydrogen and helium isotopes

Введение

Лёгкие атомы (атомы водорода, гелия и их изотопов) могут перемещаться по решётке кремния в виде коллектива, состоящего из самого лёгкого атома и сопровождающих его обратимых смещений ближайших атомов решётки. Такое перемещение описывается солитоном Френкеля-Конторовой [3; 6] и имеет характеристики классической нелинейной механики.

Лёгкие атомы имеют изотопы. И масса такого атома влияет на перемещение солитона. Между тем, атомы водорода и гелия, помимо разных масс, могут быть в разных квантовых состояниях, определяемых состояниями электронов в атоме. Квантовые состояния определяют поляризуемость атома. Эти состояния не зависят от массы атома, поскольку отношение $(\Delta E/E)$ изменения энергии ΔE электрона к энергии его состояния E оказывается того же порядка, что и отношение массы электрона к массе ядра $(\Delta E/E \sim m_e/M_n \sim 10^{-3})$ [1]. В таком случае, можно было бы ожидать, что поляризуемость атома не будет влиять на перемещения солитона. Но поляризуемость атома есть реакция атома на возможные изменения внутрикристаллического электрического поля. В таком случае важно выяснить как квантовое состояние (внутреннее состояние) атома, образующего коллектив вместе с обратимыми смещениями ближайших атомов решётки и перемещающегося в виде солитона, может сказываться на его перемещения.

1. Модель

Внутри кристалла действуют сильные электрические поля порядка $10^7 \div 10^8 \frac{V}{cm}$. Такие поля в состоянии сделать из атома диполь. Превращение атома в диполь под воздействием внешнего электрического поля характеризуется поляризуемостью. Поле диполя будет стремиться уменьшить потенциальную энергию взаимодействия этого диполя с внешним по отношению к нему локальным электрическим полем, увеличивая при этом упругую энергию взаимодействия атома с окружением. В свою очередь, уменьшение упругой энергии происходит с переходом в соседнюю позицию и сопровождается возникновением диполя атома и его взаимодействием с локальным электрическим полем, вызванным возмущением электронной плотности в окружающем пространстве [6] и т. д. И такое поведение приводит к

перемещению коллектива, состоящего из самого лёгкого атома и сопровождающих его обратимых смещений ближайших атомов решётки. Перемещение лёгкого атома через кристалл описывается солитоном Френкеля-Конторовой [3; 6]:

$$\Gamma_{z,n} = \left(2a_{z,n}/\pi \right) \arctg \left(C_0 \exp \left(- \left(2\pi/a_{z,n} \right) \sqrt{-A/m^\#} \cdot (t - n\tau) \right) \right). \quad (1)$$

Из этого соотношения следует, что солитон может перемещаться только при условии, что его эффективная масса $m^\#$ будет иметь отрицательные значения ($m^\# < 0$) [2; 3; 6]. Эффективная масса $m^\#$ определяется массой самого атома водорода m , его β – поляризуемостью = $0.667A^3$, структурой решётки: числом связей Z атома водорода с окружением, a_n – расстоянием между междоузлиями решётки и модулем сдвига решётки $G = 79.9 \cdot 10^{10} \text{ din/cm}^2$:

$$m^\# = m \cdot \left(1 - Z \cdot e^2 / \beta \cdot G \cdot a_n \right)^{-1} \quad (2)$$

Здесь значение A определяется модулем сдвига для кремния и численно равно $G a_n^3 / 4\pi^2$, заряд электрона: $e = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ g}^{1/2} \cdot \text{cm}^{3/2} / \text{sec}$.

Полученный солитон описывает движение коллектива, который состоит из самого атома и обратимых смещений окружения. Так, например, рис. 1 показывает переход атома водорода из одного положения в другое. Такой переход позволяет понять какое количество атомов окружения участвует в формировании солитона. В формировании солитона участвует от 9 (и более) атомов ближайшего окружения (хотя количество связей $Z = 6$).

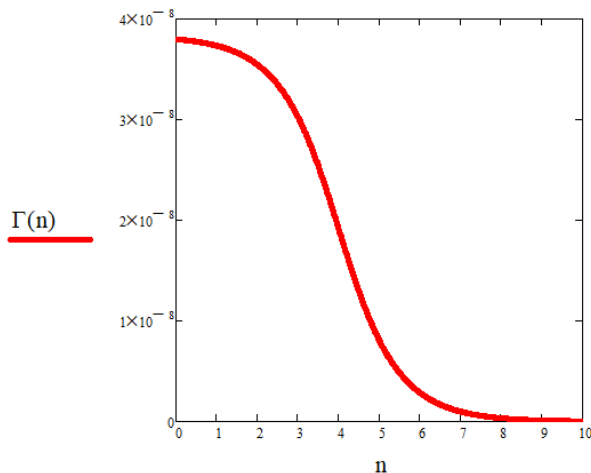


Рис. 1 / Fig. 1 Часть солитона, образованного атомом водорода и сопровождающими его смещениями девяти ближайших атомов решётки кремния / Part of a soliton, which is formed by the hydrogen atom and the accompanying displacements of nine nearest lattice atoms

Источник: составлено авторами.

2. Влияние поляризуемости на перемещение водорода и его изотопов

Из соотношения (2) видно, что эффективную массу контролирует поляризуемость β – атома водорода (см. табл. 1).

Таблица 1 / Table 1

Соотношение поляризуемости и эффективной массы для водорода и его изотопов /
Ratio of polarizability and effective mass for hydrogen and its isotopes

Атом	Поляризуемость, β $10^{-24} \text{ (cm}^3\text{)}$	масса, m , (g) $\times 10^{-24}$	эффективная масса $m^\#, \text{ (g)} \cdot 10^{-26}$
^1H	0.667	1.67	–2.5059
^2H	0.667	$2 \cdot 1.67$	–5.0118
^3H	0.667	$3 \cdot 1.67$	–7.5176

Источник: составлено авторами на основе [4].

Эффективные массы для водорода и его изотопов отрицательны, это означает, что солитон будет перемещаться.

Поляризуемости β и найденные эффективные массы существенно влияют на перемещение атомов. Так, например, для водорода и его изотопов графики перемещения будут иметь следующий вид, представленный на рис. 2, 2а и 2б.

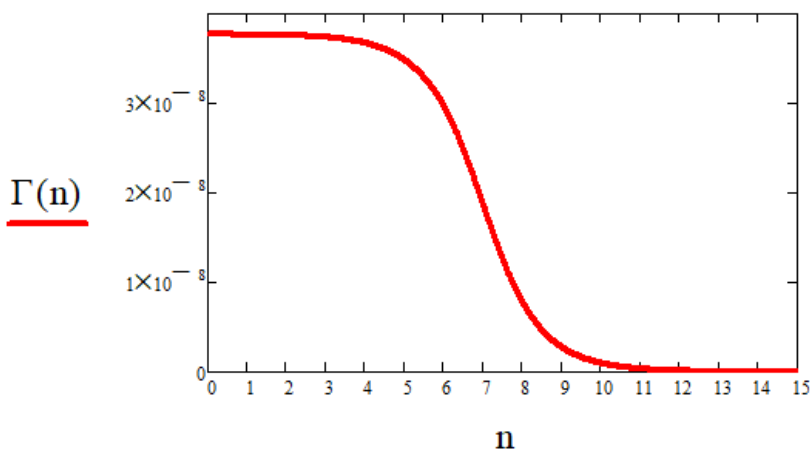


Рис. 2 / Fig. 2 Структура солитона, образованного атомом водорода с β для ^1H /
Structure of a soliton formed by a hydrogen atom with β for ^1H

Источник: составлено авторами.

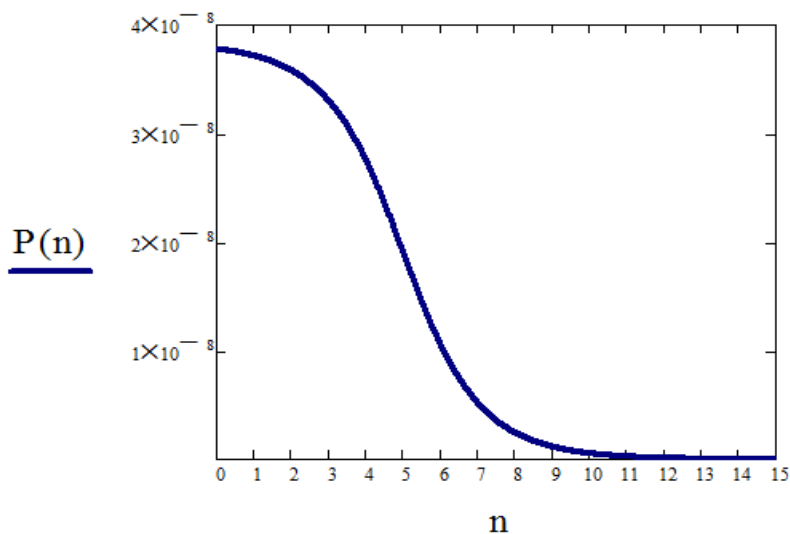


Рис. 2а / Fig. 2a Структура солитона, образованного атомом дейтерия с β для ${}^2\text{H}$ /
Structure of a soliton formed by a deuterium atom with β for ${}^2\text{H}$

Источник: составлено авторами.

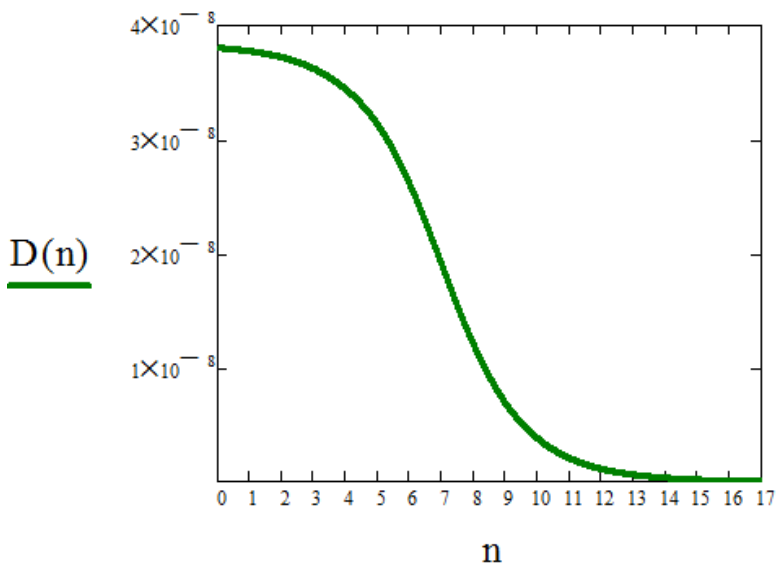


Рис. 2б / Fig. 2b Структура солитона, образованного атомом трития с β для ${}^3\text{H}$ /
Structure of a soliton formed by a tritium atom with β for ${}^3\text{H}$

Источник: составлено авторами.

Солитоны, приведённые на рис. 2, 2a и 2b, движутся слева направо. Структура солитонов определяется зависимостью смещения $\Gamma_{z,n}$ на каждом узле n виртуальной цепочки и организована числом n ближайших атомов окружения решётки кремния. Например, для водорода ^1H , число атомов, участвующих в формировании «ступеньки» – солитона и его перемещения – равно 11. Для дейтерия ^2H число участников, формирующих солитон, равно 13. А для трития ^3H число ближайших атомов решётки кремния равно 15. При этом «темп» перехода в соседнее положение у всех этих солитонов разный (см. рис. 3) и определяется скоростью перемещения каждого из солитонов [3]. Верхняя часть (горизонтальная) соответствует ситуации, при которой атом водорода уже завершил переход на расстояние, равное междоузельному расстоянию. Остальные узлы виртуальной цепочки сразу начинают смещаться каждый на своё расстояние и со своей скоростью (например, на рис. 2b для трития узел с номером 7 теперь же сместился на расстояние равное 2×10^{-8} см). Эта часть солитона соответствует неустойчивым положениям атома водорода, которые завершатся достижением смещения, равного смещению на дистанцию, равную междоузельному расстоянию. Нижняя горизонтальная часть структуры солитона соответствует ситуации, при которой возмущение не достигло узла виртуальной цепочки.

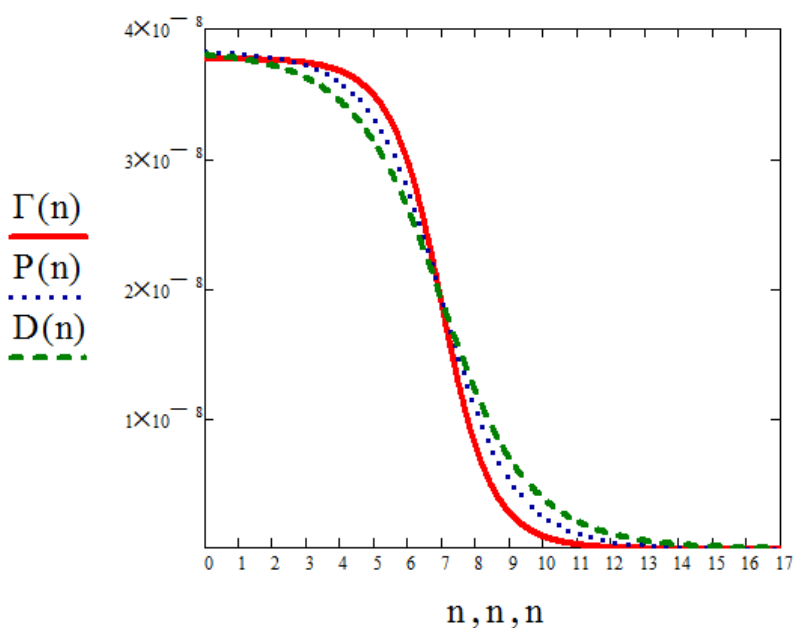


Рис. 3 / Fig. 3 Сопоставление форм перехода в соседнюю позицию для ^1H , ^2H , ^3H /
Comparison of the forms of transition to the neighboring position for ^1H , ^2H , ^3H

Источник: составлено авторами.

Для атомов гелия ситуация, связанная со строением солитона, аналогичная. Но влияние поляризуемости атома на возможность перемещений солитона более «жесткая», см. табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Соотношение поляризуемости и эффективной массы для гелия и его изотопов /
Ratio of polarizability and effective mass for helium and its isotopes

Атом	Состояния	Поляризуемость, β , (cm^3)	Масса, m , (g) $\times 10^{-24}$	Эффективная масса $m^{\#}$, (g). $\times 10^{-24}$
2He	1^1S_0	$2.03 \cdot 10^{-23}$	$2 \cdot 1.67$	-2.73098
3He	1^1S_0	$2.03 \cdot 10^{-23}$	$3 \cdot 1.67$	-4.09647
4He	1^1S_0	$2.03 \cdot 10^{-23}$	$4 \cdot 1.67$	-5.46195
2He	2^1S_0	$4.67 \cdot 10^{-21}$	$2 \cdot 1.67$	3.372
3He	2^1S_0	$4.67 \cdot 10^{-21}$	$3 \cdot 1.67$	5.0589
4He	2^1S_0	$4.67 \cdot 10^{-21}$	$4 \cdot 1.67$	6.74525

Источник: составлено авторами на основе [4; 5; 7].

Из табл. 2 следует, что атом гелия и его изотопы (первые три строки таблицы), находясь в основном состоянии 1^1S_0 , обеспечивают отрицательную эффективную массу солитона и благодаря этому солитон может перемещаться. Однако для метастабильного состояния 2^1S_0 (последние три строчки, табл. 2) изотопы гелия не могут перемещаться, поскольку эффективная масса солитона оказывается положительной.

Заключение

Из сопоставления зависимостей (рис.2, 2a,2b) смещения $\Gamma_{z,n}$ солитона Френкеля-Конторовой от числа возможных положений лёгких атомов в виртуальной цепи можно отметить: поляризуемость β в сочетании с реальной массой атома (водорода, дейтерия, трития, гелия и его изотопов) существенным образом влияет на эффективную массу солитона, на его формирование и на сам переход его в следующие позиции. При этом атом с малой массой не может обеспечить перемещение солитона, а атом с большой массой может двигаться в виде солитона. Но, опять же, перемещение солитона по решётке определяется несколькими независимыми факторами:

- 1) массой атома (его изотопом) и его квантовым состоянием (поляризуемостью);
- 2) свойствами решётки – её строением и её упругими свойствами.

Статья поступила в редакцию 02.05.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Механика. М.: Физматлит, 2018. 224 с.
2. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. М: Физматгиз, 1958. 368 с.
3. Askerova V., Kalashnikov E. Movement of a Hydrogen Atom through Interstices in a Diamond-Like Lattice // *Defect and Diffusion Forum*. Vol. 420. *Advances in Mass and Thermal Transport in Engineering Materials III*. Switzerland: Trans Tech Publications Ltd, 2022. P. 162–171. DOI: 10.4028/p-g1zj73.
4. Bethe H. A., Salpeter E. E. Atoms in external fields // Bethe H. A., Salpeter E. E. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Berlin: Springer, 1957. P. 205–247.
5. Chang K. T., Hurst R. P. Dipole polarizabilities of the 2^3S_1 and 2^1S_0 states of He and Li^+ // *Physical Review*. 1966. Vol. 152. Iss. 1. P. 35–41. DOI: 10.1103/PhysRev.152.35.
6. Helium transport along lattice channels in crystalline quartz / Kalashnikov E., Tolstikhin I., Lehmann B., Pevzner B. // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2003. Vol. 64. Iss. 11. P. 2293–2300. DOI: 10.1016/S0022-3697(03)00264-6.
7. Stewart A. L. Dipole polarizabilities of $2^{1,3}S$ states in the helium isoelectronic sequence // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. 1969. Vol. 2. No. 12. P. 1309–1312. DOI: 10.1088/0022-3700/2/12/309.

REFERENCES

1. Landau L. D., Lifshitz E. M. *Mechanics. Course of Theoretical Physics. Vol. 1*. Oxford, Elsevier Science Ltd., 2020.
2. Frenkel Ya. I. *Vvedenie v teoriyu metallov* [Introduction to the theory of metals]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1958. 368 p.
3. Askerova V., Kalashnikov E. Movement of a Hydrogen Atom through Interstices in a Diamond-Like Lattice. In: *Defect and Diffusion Forum. Vol. 420. Advances in Mass and Thermal Transport in Engineering Materials III*. Switzerland, Trans Tech Publications Ltd, 2022, pp. 162–171. DOI: 10.4028/p-g1zj73.
4. Bethe H. A., Salpeter E. E. Atoms in external fields. In: Bethe H. A., Salpeter E. E. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Berlin, Springer, 1957, pp. 205–247.
5. Chang K. T., Hurst R. P. Dipole polarizabilities of the 2^3S_1 and 2^1S_0 states of He and Li^+ . In: *Physical Review*, 1966, vol. 152, iss. 1, pp. 35–41. DOI: 10.1103/PhysRev.152.35.
6. Kalashnikov E., Tolstikhin I., Lehmann B., Pevzner B. Helium transport along lattice channels in crystalline quartz. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2003, vol. 64, iss. 11, pp. 2293–2300. DOI: 10.1016/S0022-3697(03)00264-6.
7. Stewart A. L. Dipole polarizabilities of $2^{1,3}S$ states in the helium isoelectronic sequence. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 1969, vol. 2, no. 12, pp. 1309–1312. DOI: 10.1088/0022-3700/2/12/309.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Аскерова Вера Исламовна – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;

e-mail: vera_askerova@mail.ru

Калашников Евгений Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительной математики и информационных технологий Государственного университета просвещения;

e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Vera I. Askerova – Postgraduate Student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, State University of Education

e-mail: vera_askerova@mail.ru

Evgeniy V. Kalashnikov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Computational Mathematics and Information Technologies, State University of Education

e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Аскерова В. И., Калашников Е. В. Влияние поляризуемости лёгкого атома (и его изотопов) на его перемещение в виде солитона Френкеля-Конторовой по алмазоподобной решётке // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2023. № 2. С. 20–28.

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-20-28.

FOR CITATION

Askerova V. I., Kalashnikov E. V. Effect of polarizability of a light atom (and its isotopes) on its movement in the form of a Frenkel-Kontorova soliton through a diamond-like lattice. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 2, pp. 20–28.

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-20-28.