

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Нулевая энергия и нулевые колебания:
как они обнаруживаются экспериментально

Ю.М. Ципенюк

Рассмотрены вопросы развития квантовых предсказаний о существовании нулевой энергии системы, находящейся в потенциальной яме, экспериментального обнаружения нулевой энергии по электронно-колебательным спектрам молекул с разными изотопами (изотоп-эффект). Обсуждается проявление нулевых колебаний атомов кристаллической решётки в дифракционном рассеянии рентгеновских лучей и нейтронов от кристаллов, а также в температурной зависимости вероятности эффекта Мёссбауэра. Рассматривается эксперимент по измерению нулевых колебаний воды в нанотрубке для выяснения формы потенциальной энергии системы, роль нулевых колебаний в динамике электронов в полупроводниках. Обсуждаются эксперименты по оптическому охлаждению механических осцилляторов и наблюдению их квантового поведения.

PACS numbers: 03.65. – w, 03.65.Ge, 61.05.cp, 61.05.Qr

DOI: 10.3367/UFNr.0182.201208e.0855

Содержание

1. Введение (855).
 2. Развитие представлений о нулевой энергии (856).
 3. Изотоп-эффект в электронно-колебательных спектрах молекул (857).
 4. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов на кристаллах (859).
 5. Проявление нулевых колебаний в вероятности эффекта Мёссбауэра (861).
 6. Наблюдение квантовых эффектов в макроскопических осцилляторах (862).
 7. Оптическое охлаждение наномеханических осцилляторов (864).
 8. Заключение (866).
- Список литературы (867).

1. Введение

В классической физике полная энергия частицы, на которую действует некая консервативная сила с потенциалом U , выражается в виде

$$E = \frac{mv^2}{2} + U(r). \quad (1)$$

Ю.М. Ципенюк. Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, ул. Косыгина 2, 119334 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 137-65-77
E-mail: tsip@kapitza.ras.ru
Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер. 9, 141790 г. Долгопрудный, Московской обл., Российская Федерация

Статья поступила 4 февраля 2011 г.,
после доработки 27 декабря 2011 г.

Для того чтобы найти основное состояние частицы, надо "обнулить" её скорость и поместить частицу в точку, в которой её потенциальная энергия U будет минимальна. Но мы получим результат, являющийся лишь классическим приближением реального мира. Дело в том, что в классической физике положение частицы в пространстве и её импульс (скорость) однозначно определены, а это противоречит основным принципам квантовой физики, в которой, согласно соотношению неопределённости, положению частицы в фазовом пространстве соответствует не точка, а некая область размером $(2\pi\hbar)^3$. Отсюда следует, что частица обладает так называемой нулевой энергией E_0 , т.е. полная энергия частицы больше минимальной классической энергии на E_0 . Если мы имеем дело с частицей, находящейся в одномерном параболическом потенциале (гармонический осциллятор), то нулевая энергия, как впервые было показано Гейзенбергом в 1925 г. [1], равна $\hbar\omega/2$, где ω — классическая круговая частота колебаний частицы (в трёхмерном гармоническом потенциале $E_0 = 3\hbar\omega/2$). Нулевая энергия, которая играет роль аддитивной постоянной, может рассматриваться как уровень отсчёта энергии.

Естественно связать нулевую энергию с неким движением, поэтому говорят, что частица совершает нулевые колебания. Конечно, последнее утверждение основано просто лишь на аналогии с классической физикой, никакого "классического" движения частицы не происходит, так как импульс частицы в стационарном состоянии не имеет определённого значения, т.е. нет определённой траектории частицы. Состояние частицы, согласно квантово-механическому описанию, определяется волновой функцией $\psi(r)$, квадрат модуля которой задаёт распределение вероятностей значений координат: $|\psi|^2 dq$ есть вероятность того, что произведённое над системой измерение обнаружит значения координат частицы в элементе dq конфигурационного пространства.

Вполне естественно задаться вопросом: можно ли экспериментально обнаружить нулевую энергию и наблюдать нулевые колебания?

Хотя нулевые колебания рассматриваются во многих книгах и учебниках, вопрос об экспериментальном подтверждении существования нулевых колебаний в них практически не обсуждается, лишь иногда приводятся туманные фразы о том, что прямым доказательством этого явления являются эксперименты по рассеянию света. Так, например, в книге Блохинцева *Основы квантовой механики* [2] говорится следующее:

"Экспериментально удаётся доказать наличие нулевой энергии и нулевых колебаний атомов путём наблюдения рассеяния света кристаллами. Рассеяние света обусловлено колебаниями атомов. По мере уменьшения температуры амплитуда колебаний согласно классической теории должна неограниченно уменьшаться, а вместе с тем должно исчезать и рассеяние света. Между тем опыт показывает, что интенсивность рассеяния света по мере уменьшения температуры стремится к некоторому предельному значению, указывающему на то, что и при абсолютном нуле колебания атомов не прекращаются. Этот факт подтверждает существование нулевых колебаний".

Практически то же самое утверждение приводится Ждановым [3], Мигдалом [4], Фейнбергом [5], Левичем [6], Савельевым [7], Иродовым [8], Мартинсоном и Смирновым [9], Мостепаненко и Труновым [10], Ельяшевичем и Барсуковым [11], и оно даже попало в Интернет [12], что побудило автора настоящей статьи подробно разобраться с этим вопросом, и, как мы увидим, приводимое во всех перечисленных работах утверждение такого рода является не совсем корректным.

2. Развитие представлений о нулевой энергии

Как указывалось во введении, квантово-механическое объяснение существования нулевой энергии было дано Гейзенбергом в 1925 г., однако появился этот термин намного раньше, в 1911 г., ещё до создания квантовой механики, в так называемой второй работе Планка [13]. О том, как отреагировало научное сообщество на появление термина "нулевая энергия", подробно описано в книге Френкеля и Явелова [14]. В западной литературе этому вопросу посвящены работа Милонни и Шиха [15] и работы Милонни [16, 17].

В своей первой работе, посвящённой теории равновесного теплового излучения, Планк рассматривал систему, состоящую из большого числа резонаторов и излучения, предполагая при этом, что энергия осциллятора, поглощающего и испускающего тепловое излучение частотой ν , всегда является произведением кванта энергии $h\nu$ на целое число. Как хорошо известно, Планку не нравилось то, что для объяснения экспериментально наблюдаемого спектра излучения чёрного тела ему пришлось "заставить" осциллятор поглощать и излучать энергию порциями $h\nu$. В попытках если не ликвидировать, то как-нибудь сгладить это разительное противоречие с классической электродинамикой Планк в 1911 г. пришёл к своей второй квантовой теории, в которой уже только излучение энергии считалось дискретным, а её поглощение предполагалось непрерывным. При таком подходе Планку удалось вывести надёжно проверенную в экспериментах формулу для спектра излуче-

ния чёрного тела, но возникла новая загадка: оказалось, что, поскольку осциллятор может поглотить энергию, меньшую одного кванта, которую он излучить не в силах (так как по-прежнему предполагается, что энергия излучается только целыми квантами), эта доля энергии кванта никогда не покинет осциллятор, даже при абсолютном нуле температуры, когда, согласно классическим представлениям, колебания осциллятора должны полностью прекратиться и, следовательно, его энергия должна уменьшиться до нуля. Из второй теории Планка следовало, что средняя энергия осциллятора при нулевой абсолютной температуре равна не нулю, а $h\nu/2$.

Рассмотрим подробно, каким образом Планк пришёл к выводу о существовании нулевой энергии. Он предполагал, что поглощение излучения происходит в соответствии с классической теорией, тогда как излучение энергии происходит дискретными порциями (квантами). Итак, пусть осциллятор может излучать только после того, как он непрерывно поглотил энергию $h\nu$, и пусть P_n — вероятность того, что энергия осциллятора заключена в интервале между $(n-1)h\nu$ и $nh\nu$. Когда в результате поглощения излучения энергия осциллятора достигнет величины $nh\nu$, то с вероятностью p он излучит эту энергию, а с вероятностью $1-p$ будет продолжать поглощать падающее излучение. Таким образом,

$$P_2 = P_1(1-p), \quad P_3 = P_2(1-p) = P_1(1-p)^2, \dots, \\ P_n = P_1(1-p)^{n-1}, \quad (2)$$

причём

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_n = \sum_{n=1}^{\infty} P_1(1-p)^{n-1} = \frac{P_1}{p}, \quad (3)$$

но сумма (3) должна быть равна 1, значит, $P_1 = p$ — это вероятность того, что осциллятор находится в равновесии с излучением и обладает значением энергии между 0 и $h\nu$, а $P_2 = p(1-p)$ — вероятность того, что его энергия лежит в интервале между $h\nu$ и $2h\nu$. Соответственно $P_n = p(1-p)^{n-1}$ — вероятность того, что энергия осциллятора принадлежит интервалу между $(n-1)h\nu$ и $nh\nu$.

Следовательно, энтропия осциллятора выражается в виде

$$S = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} P_n \ln P_n = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} p(1-p)^{n-1} \ln [p(1-p)^{n-1}] = \\ = -k_B \left[\frac{1}{p} \ln p + \left(\frac{1}{p} - 1 \right) \ln \left(\frac{1}{p} - 1 \right) \right]. \quad (4)$$

Далее Планк предположил, что осциллятор с равной вероятностью обладает энергией, лежащей в интервале от $(n-1)h\nu$ до $nh\nu$, поэтому его средняя энергия в этом интервале

$$\bar{U}_n = \frac{1}{2} (n + n - 1) h\nu = \left(n - \frac{1}{2} \right) h\nu. \quad (5)$$

Таким образом, средняя энергия осциллятора имеет вид

$$\bar{U} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(n - \frac{1}{2} \right) h\nu P_n = h\nu \sum_{n=1}^{\infty} \left(n - \frac{1}{2} \right) p(1-p)^{n-1} = \\ = \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{2} \right) h\nu, \quad (6)$$

т.е. $1/p = \bar{U}/hv + 1/2$, и для энтропии мы получаем следующее выражение:

$$S = k_B \left[\left(\frac{\bar{U}}{hv} + \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{\bar{U}}{hv} + \frac{1}{2} \right) - \left(\frac{\bar{U}}{hv} - \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{\bar{U}}{hv} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (7)$$

И окончательно, используя термодинамическое соотношение $\partial S/\partial U = 1/T$, Планк приходит к формуле для энергии равновесного излучения

$$\begin{aligned} \bar{U} &= \frac{1}{2} hv \frac{\exp(hv/k_B T) + 1}{\exp(hv/k_B T) - 1} = \frac{1}{2} hv \frac{\exp(hv/k_B T) - 1 + 2}{\exp(hv/k_B T) - 1} = \\ &= \frac{hv}{\exp(hv/k_B T) - 1} + \frac{1}{2} hv. \end{aligned} \quad (8)$$

Как следует из выражения (8), $U \neq 0$ при $T \rightarrow 0$, т.е. при $T \rightarrow 0$ энергия $\bar{U} \rightarrow hv/2$.

Казалось бы, в отношении примирения с классической картиной замена квантового поглощения конечной нулевой энергией ничем не лучше, но Планка больше устраивала его вторая теория, в частности потому, что на её основе он надеялся покончить со столь несимпатичными ему световыми квантами Эйнштейна, с помощью которых так удачно был объяснён фотоэлектрический эффект. По словам Борна, эта странная теория, которую сам Планк считал очень ценной, сначала встретила довольно сдержанный приём. С точки зрения современной квантовой механики эта вторая теория Планка не может считаться верной, однако вывод о существовании энергии при абсолютном нуле, или, как принято говорить, нулевой энергии, оказался верным.

Эта идея вскоре была подхвачена Эйнштейном и Штерном [18], которые показали, что в таком случае планковский спектр может быть получен фактически из чисто классического рассмотрения. Эйнштейн и Штерн показали, что если постулировать существование нулевой энергии осциллятора, т.е. считать, что его средняя энергия равняется $U + \hbar\omega$, то можно легко получить для теплового излучения планковский спектр. Правда, постулированная Эйнштейном и Штерном нулевая энергия была вдвое больше, чем у Планка. Поэтому выглядит странным, как получился правильный результат. Всё дело в том, что надо бы было учесть нулевую энергию поля, но Эйнштейн и Штерн приписали всю нулевую энергию материальному дипольному осциллятору. Как показано в работе Милони и Шиха [15], если добавить величину $hv/2$ к энергии каждой моды электромагнитного поля, то действительно получается правильная формула Планка:

$$\bar{U} = \frac{hv}{\exp(hv/k_B T) - 1}. \quad (9)$$

С формулой (9) связано некое курьёзное обстоятельство, отмеченное Эйнштейном и Штерном. Рассмотрим классический предел формулы (9), т.е. случай $k_B T \gg \hbar\omega$:

$$\begin{aligned} U &= \frac{hv}{\exp(hv/k_B T) - 1} \approx \\ &\approx \frac{hv}{1 + hv/k_B T + (1/2)(hv/k_B T)^2 - 1} \approx k_B T - \frac{1}{2} hv, \end{aligned} \quad (10)$$

т.е. к классическому пределу $k_B T$ стремится не U , а величина $U + hv/2$. К средней энергии осциллятора должна быть добавлена нулевая энергия, что и сделал Планк. Конечно, нет никаких оснований серьёзно относиться к этому выводу.

Однако довольно скоро нулевая энергия приобрела популярность. За работой Эйнштейна и Штерна [18] последовало много теоретических расчётов, эксплуатировавших представление о нулевой энергии, движениях, колебаниях при нулевой температуре в целях объяснения различных непонятных экспериментальных зависимостей, но эти работы носили в значительной мере спекулятивный характер и были мало обоснованными.

Дискуссия о нулевой энергии развернулась осенью 1913 г. на II Сольвеевском конгрессе после доклада Лауэ по дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решётке [19]. Нернст затронул вопрос о реальности нулевых колебаний атомов кристаллической решётки, отвечающих нулевой энергии. Если эти колебания настолько же реальны, как и обычные упругие колебания, ответственные за теплоёмкость твёрдого тела, то они должны как-то влиять на картину дифракции рентгеновских лучей, о которой пойдёт речь далее. Против такого представления о нулевой энергии резко выступил в дискуссии Эйнштейн. "*Имеются серьёзные возражения против гипотезы о том, что нулевая энергия относится к упругим колебаниям*", — отметил он. — *Действительно, если энергия упругих колебаний при понижении стремится не к нулю, а к конечному положительному значению, то для всех зависящих от температуры свойств твёрдых тел следует ожидать подобной же зависимости, а именно стремления к постоянным и конечным значениям при низких температурах*".

При дальнейшем обмене репликами Эйнштейн сказал, что, по его мнению, нулевая энергия планковского осциллятора не равнозначна нулевым упругим колебаниям кристаллической решётки, которые, если они всё-таки существуют, должны неизбежно проявляться, как заметил Нернст, в картине рентгеновской дифракции в кристалле. Как мы увидим в дальнейшем, именно влияние нулевых колебаний на картину дифракции рентгеновских лучей явилось первым экспериментальным доказательством их существования.

То, что нулевая энергия должна быть и у поля, впервые в 1916 г. предположил Нернст [20], который проанализировал следующее из второй работы Планка по тепловому излучению существование нулевой энергии и результаты Эйнштейна и Штерна и пришёл к выводу о том, что Вселенная должна быть заполнена огромной нулевой энергией. Как отметил Лэмб, абсолютного вакуума в классическом смысле не существует.

3. Изотоп-эффект в электронно-колебательных спектрах молекул

Первое указание на реальность нулевой энергии было сделано в 1924 г. Малликоном [21], который проанализировал эмиссионные спектры двух молекул ВО — с лёгким (^{10}B) и тяжёлым (^{11}B) изотопами бора. Затем этот вывод был подтверждён в работе Дженкина и Ласло [22].

Оптические спектры атомов называются линейчатыми, так как они состоят из отдельных спектральных линий, повторяющих форму входной щели спектрометра. Для спектров молекул характерно наличие спект-

ральных полос, поэтому они называются полосатыми. Рассмотрим колебательные спектры двух двухатомных молекул, различающихся только изотопным составом образующих их атомов. Поскольку приведённые массы μ этих двух колебательных систем различны, то будут различаться и их колебательные частоты $\omega = \sqrt{\gamma/\mu}$ (где γ — колебательная жёсткость молекулы). Эта разница мала, но достаточна для обнаружения. Спектр колебаний каждой из двух молекул с учётом ангармоничности определяется выражением

$$E_v = \hbar\omega \left[\left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots \right], \quad (11)$$

где константы ω , x_e , y_e, \dots определяются конкретными свойствами молекулы, v — колебательное квантовое число, $v = 0, 1, 2, \dots$. Разность энергий между колебательными состояниями, соответствующими колебательным числам v и v' , определяются соотношением

$$\hbar\omega_{v,v'} = |E_v - E_{v'}|. \quad (12)$$

Анализируя колебательную структуру электронных спектров двух молекул, $^{10}\text{B}^{16}\text{O}$ и $^{11}\text{B}^{16}\text{O}$, Малликен обнаружил, что наилучшее описание эмиссионных спектров получается только в том случае, если в формуле (11) учитывать член $1/2$, т.е. нулевые энергии молекул. Следует особо подчеркнуть, что энергия возбуждённых колебательных состояний задаёт положение колебательных уровней по отношению к состоянию с $v = 0$, а не по отношению к минимуму потенциальной кривой. Но если мы хотим сравнить системы полос двух изотопных молекул, то мы должны знать абсолютные положения колебательных уровней двух электронных состояний, т.е. расстояния этих уровней от минимума соответствующих потенциальных кривых. Поэтому разность $\Delta(\hbar\omega)$ между энергиями состояний v' и v'' надо записывать в виде

$$\Delta(\hbar\omega) = \hbar\omega'_e + \hbar\omega'_e \left(v' + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega'_e x'_e \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots - \left[\hbar\omega''_e \left(v'' + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega''_e x''_e \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \right] \quad (13)$$

с её полуцелыми колебательными квантами. Одним штрихом здесь отмечены величины, относящиеся к возбуждённому состоянию, а двумя — к основному.

Естественно считать, что электронные энергии и потенциальные кривые для каждого электронного состояния двух изотопных молекул, таких как ^{10}BO и ^{11}BO , практически одинаковы, поскольку число электронов и поле, в котором они движутся, в обоих случаях одинаковы. Поэтому энергии чисто электронных переходов ($\hbar\omega$) для двух изотопных молекул также будут одинаковы. Однако система колебательных полос более тяжёлой молекулы будет сжата по сравнению с системой полос более лёгкой молекулы, как показано на рис. 1.

В таблице приведены измеренные в работе Дженкина и Мак-Келлера [23] величины изотопического смещения (см^{-1}) в серии v' при $v'' = 0$ α -полос молекулы BO .

Особенно важное значение имеет то обстоятельство, что, как видно из таблицы, непосредственно наблюдалась разность энергий перехода $E_{00}^1 - E_{00}^h$ из состояния

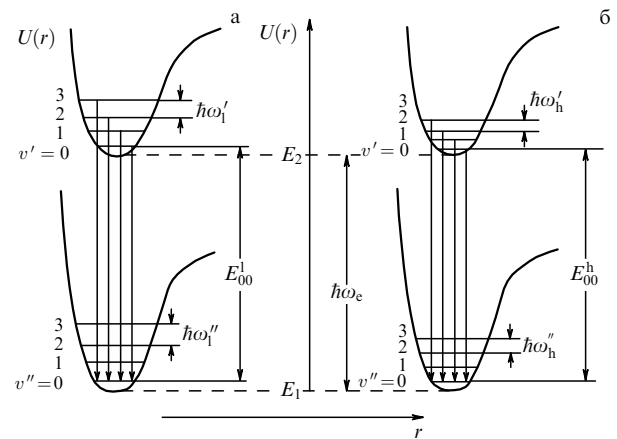


Рис. 1. Качественная картина электронно-колебательных переходов: колебательный спектр молекулы с лёгким (а) и тяжёлым (б) изотопом (для наглядности масштаб сильно искажён). Стрелками показаны переходы из состояний v' в состояния $v'' = 0$, наблюдаемые в эмиссионных спектрах. Индексы l и h относятся соответственно к лёгкому и тяжёлому изотопам бора.

Таблица. Изотопические смещения [см^{-1}] в серии v' при $v'' = 0$ α -полос молекулы BO [23].

Полоса	Наблюдённая разность энергий ($^{10}\text{BO} - ^{11}\text{BO}$)	Результаты расчёта	
		С учётом нулевой энергии	Без учёта нулевой энергии
0-0	-8,6	-9,08	0
1-0	+26,7	+26,29	+35,69
2-0	+60,8	+60,36	+70,09
3-0	+93,6	+93,14	+103,20

$v' = 0$ в состоянии $v'' = 0$ (смещение 0-0-полосы). Этот факт является прямым доказательством существования нулевой энергии. Кроме того, величины изотопического смещения полос, вычисленные на основе предположения о полувцелых колебательных квантах, также находятся в прекрасном согласии с результатами эксперимента.

Нулевое изотопическое смещение для 0-0-полосы обусловлено тем, что нулевые энергии в верхнем и нижнем состояниях различны для двух изотопных молекул. Дело в том, что потенциальные кривые для основного и возбуждённого электронных состояний различны, т.е. соответствуют разным колебательным жёсткостям и, следовательно, разным частотам колебаний молекулы. Рассмотрим в качестве примера молекулу водорода, имеющую всего два электрона. Если один из электронов движется на большом расстоянии от ядер (у него большое квантовое число n), то в этом случае притяжение между двумя атомами будет, очевидно, совершенно другим, чем тогда, когда оба электрона находятся очень близко от ядер.

Итак, пусть мы имеем две двухатомные молекулы с разными массами одного из атомов ($M_1 < M_2$), т.е. приведённая масса молекулы с лёгким изотопом μ_1 меньше, чем у молекулы с тяжёлым изотопом (μ_2). Пусть, вследствие различия потенциальных кривых молекул, в возбуждённом электронном состоянии частота колебаний атомов в $\beta < 1$ раз меньше (для обеих изотопных молекул), т.е. $\omega' = \beta\omega''$, а за счёт разных масс у молекулы с меньшей массой одного из атомов частота колебаний $\omega = \sqrt{k/\mu}$ в α раз больше ($\alpha > 1$). Тогда разность энергии 0-0-переходов из состояния $v' = 0$ в состояние $v'' = 0$ у

этих молекул (без учёта ангармоничности)

$$\begin{aligned} \Delta E_{00} &= E_{00}^1 - E_{00}^h = \hbar\omega_e + \frac{\hbar}{2} \omega_1''(1 - \beta) - \hbar\omega_e - \\ &- \frac{\hbar}{2} \omega_h''(1 - \beta) = \frac{\hbar}{2} (1 - \beta)(\omega_1'' - \omega_h'') = \\ &= \frac{\hbar}{2} \omega''(1 - \beta)(\alpha - 1), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\hbar\omega_e$ — разность энергий возбуждённого и основного электронных состояний (см. рис. 1). Таким образом, мы видим, что $\Delta E_{00} = 0$ как при $\alpha = 1$ (одинаковые молекулы), так и при $\beta = 1$ (одинаковый потенциал в основном и возбуждённом состояниях).

4. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов на кристаллах

Рассмотрим вначале рассеяние рентгеновских лучей. Следует сразу подчеркнуть, что сечение рассеяния рентгеновских лучей на электронах в $\approx 10^7$ раз больше, чем на ядрах, поэтому можно учитывать только взаимодействие излучения с электронами. Для описания многоэлектронных систем в основном состоянии вводится одночастичная функция плотности электронов ρ . Электронная плотность ρ — это средняя по межэлектронным взаимодействиям функция плотности N электронов в основном состоянии, зависящая только от координат рассматриваемых точек физического пространства. Для описания рассеяния рентгеновских лучей вводится величина F , которая называется *атомным фактором рассеяния* или *формфактором*:

$$F = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin(4\pi r \sin \theta / \lambda)}{4\pi r \sin \theta / \lambda} dr = F\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right), \quad (15)$$

где $\rho(r)$ — функция распределения электронной плотности атома, θ — угол рассеяния. Формфактор атома показывает, во сколько раз эта амплитуда больше амплитуды волны, рассеиваемой электроном при тех же условиях. Для того чтобы найти величины относительных интенсивностей различных отражений от кристаллических плоскостей, характеризующихся индексами Мюллера (hkl), надо умножить формфактор атома на квадрат модуля структурной амплитуды $|F_{hkl}|^2$, которая является безразмерной величиной, характеризующей только кристаллическую структуру.

Формулы для рассеяния рентгеновских лучей впервые вывел Лауэ в 1912 г. в работе [24], но в этой работе атомы считались точечными и неподвижными. Влияние температуры на интенсивность отражения рентгеновских лучей кристаллами теоретически было рассмотрено Дебаем [25, 26] (1914 г.), а затем модифицировано Валлером [27] (1925 г.). Нагрев кристаллической решётки вызывает нерегулярные отклонения атомов от положения равновесия. Для того чтобы учесть тепловое движение атомов, кристалл рассматривают как равновесный термодинамический ансамбль, члены которого за время измерения проходят все возможные колебательные состояния. Измеряемая интенсивность представляет собой среднее по всем ядерным конфигурациям. Поэтому рассеяние рентгеновских лучей на таких колеблющихся атомах будет отличаться по фазе от такового в случае идеальной решётки и интенсивность рассеяния будет меньше. Очевидно, что чем выше температура, тем меньше интенсивность наблюдаю-

щихся пиков, соответствующих брэгговскому отражению. Дебай показал, что интенсивности интерференционных максимумов надо умножить на фактор $\exp(-W)$, где

$$W = \frac{6\hbar^2}{Mk\Theta} \frac{\phi(x)}{x} \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}. \quad (16)$$

В этой формуле, которая выведена для простой кубической решётки, состоящей из одинаковых атомов массой M , Θ — температура Дебая, θ — угол скольжения рентгеновских лучей с длиной волны λ , параметр $x = \Theta/T$ — относительная обратная температура. Функция $\phi(x)$ была протабулирована Дебаем. Если учитывать нулевые колебания атомов, то $\phi(x)/x$ должна быть заменена функцией $\phi(x)/x + 1/4$ (Дебай уже тогда, в 1913 г., ввёл нулевые колебания в свою формулу!). Как указал Валлер [27] в 1925 г., экспоненциальный множитель для простой решётки должен иметь вид $\exp(-2W)$. В пределе низких температур тепловое движение исчезает и фактор Дебая–Валлера определяется только нулевыми колебаниями.

В конце 1920-х годов Джеймс и Ферс [28] измерили рассеяние рентгеновских лучей на кристаллах каменной соли (NaCl) при разных температурах (вплоть до температуры жидкого азота). На основе полученных результатов Джеймс вместе с Валлером и Хартри опубликовали работу [29], которая явилась первым экспериментальным подтверждением существования нулевых колебаний атомов в кристаллической решётке. Вклад этих авторов в работу очевиден: Джеймс со своими коллегами получил надёжные результаты по рассеянию рентгеновских лучей от кристаллов NaCl, Валлер провёл расчёты по рассеянию рентгеновских лучей различными атомами кристаллической решётки, а Хартри на основе уравнения Шрёдингера выполнил расчёты по распределению электронной плотности в атомах Na и Cl. Ясно, что если состояние электрона описывается волновой функцией ψ_n , то распределение зарядовой плотности есть $e|\psi_n|^2$. Для нахождения зарядовой плотности в атоме надо просуммировать вклады от всех атомных электронов, что делалось численным способом. При расчётах предполагалось, что элементарный объём зарядовой плотности в атоме рассеивает излучение как свободный электрон в соответствии с классическими законами, выведенными ещё Дж.Дж. Томсоном. На рисунке 2 представлены оригинальные данные, приведённые в работе [29].

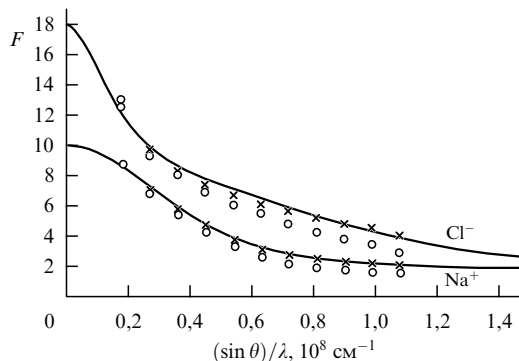


Рис. 2. Сравнение величины формфактора F , полученной экспериментально для атомов Na и Cl, с результатами расчёта, показанными сплошными кривыми; \circ — экспериментальные данные без учёта нулевых колебаний, \times — с их учётом.

Как видно, экспериментальные данные согласуются с результатами расчёта только при учёте нулевых колебаний атомов, особенно отчётливо это видно при больших углах рассеяния, и это понятно, поскольку относительный вклад нулевых колебаний является наибольшим при больших порядках отражения, т.е. больших величинах параметра $\sin \theta/\lambda$.

Отметим, что обнаружить влияние нулевых колебаний на интенсивность брэгговских пиков оказалось возможным лишь потому, что среднеквадратичная амплитуда нулевых колебаний порядка радиуса орбиты К-электрона. По данным авторов работы [29], эта амплитуда равнялась 0,12 Å для Na и 0,11 Å для Cl, тогда как максимум электронной плотности К-электрона атома Na расположен на расстоянии 0,052 Å, а у Cl — на расстоянии 0,035 Å.

В принципе, величины среднеквадратичных амплитуд нулевых колебаний $\overline{u^2}$ в кристалле легко оценить в дебаевском приближении. Нулевые колебания возможны на любой частоте в диапазоне $(0, \omega_D)$. На произвольной частоте ω справедливо соотношение

$$2 \frac{M\omega^2 \overline{u^2}}{2} = \frac{3}{2} \hbar \omega. \quad (17)$$

В классической модели $\overline{u^2} = A^2/2$, где A — классическая амплитуда колебаний (этот результат справедлив и в квантовой механике), отсюда следует $A^2(\omega) = 3\hbar/M\omega$. В дебаевской модели функция распределения частот (плотность колебаний) $g(\omega) = 3V\omega^2/(2\pi^2s^3)$. Следовательно,

$$\langle A^2 \rangle = \frac{\int_0^{\omega_D} g(\omega) A^2(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega} = \frac{9V\hbar\omega_D^2}{4M\pi^2s^3} \frac{1}{3N} = \frac{3(k_B\Theta)^2}{4\hbar\rho s^3}. \quad (18)$$

Для кристалла NaCl плотность $\rho = 2,17 \text{ г см}^{-3}$, усреднённая скорость звука $s = 4,5 \times 10^5 \text{ см с}^{-1}$, а дебаевская температура $\Theta = 275 \text{ К}$. Подставив эти значения в формулу (18), мы получим

$$\sqrt{\langle A^2 \rangle} \simeq 0,1 \text{ Å}.$$

Последняя оценка сделана для монокристаллического кристалла, но видно, что она близка к результатам работы [29].

В 1929 г. Джеймсом с коллегами были проведены аналогичные эксперименты на алюминии [30] и получены результаты, также подтверждающие существование нулевых колебаний атомов в кристаллической решётке (рис. 3). (Блохинцев, обсуждая нулевые колебания, сослался в учебнике [2] именно на [30].)

Расчёты проводились для разных величин валентности алюминия, так как не было понятно, какова реальная валентность алюминия в кристалле. Как видно, для всех ионов величины F практически всюду совпадают, за исключением области малых углов. Кривые В и С относятся к Al^{1+} при температуре 290 К. При расчёте кривой В предполагалось, что нулевые колебания существуют, а кривая С рассчитывалась без их учёта. Разными символами показаны величины F -фактора, полученные при отражении от различных плоскостей кристалла.

Тем не менее эти эксперименты не являются так называемыми *решающими экспериментами* (*crucial experiments*), так как заключение авторов основано на сравнении результатов эксперимента с данными теоретических расчётов. В этом отношении ситуация с дифракцией нейтронов лучше, поскольку рассеяние нейтронов происходит на ядрах и измерения температурной зависимости фактора Дебая–Валлера дали бы прямое подтверждение существования нулевых колебаний, так как даже при абсолютном нуле фактор Дебая–Валлера не может быть равен единице. Но абсолютные измерения фактора Дебая–Валлера в случае нейтронов, как и для рентгеновских лучей, затруднены тем, что происходит ослабление прямого и дифрагированного пучков, в частности за счёт экстинкции, и всегда имеется диффузный фон. Кроме того, детектирующая система всегда обладает конечной разрешающей способностью, что приводит к уширению наблюдаемых дифракционных пиков и уменьшению их величины. Измерения температурной зависимости фактора Дебая–Валлера для нейтронов проводились многими авторами, но в подавляющем большинстве работ они были направлены на изучение ангармоничности колебаний, т.е. зависимости температуры Дебая от температуры. Автору настоящей статьи не известны такие измерения при низких температурах. Прямая возможность наблюдения нулевых колебаний атомов в решётке появилась в начале 1960-х годов после открытия эффекта Мёсбауэра, о чём пойдёт речь в разделе 5.

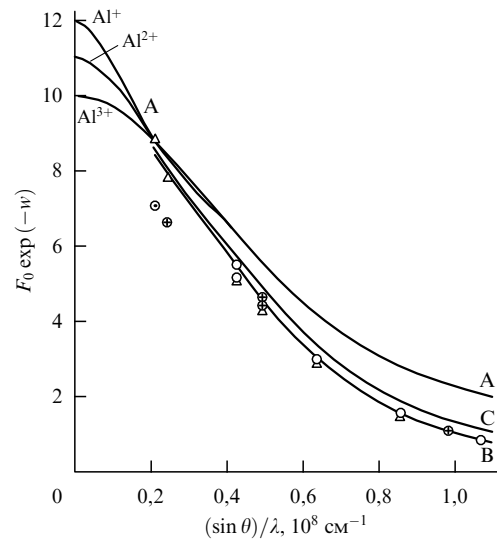


Рис. 3. Угловая зависимость фактора F для алюминия при температуре 290°C . Различными символами показаны результаты измерений (отражение от разных кристаллических плоскостей). Кривые А соответствуют расчёту для неподвижных ионов Al^{1+} , Al^{2+} и Al^{3+} . Кривые В и С соответствуют Al^{1+} ; кривая В вычислена с учётом нулевых колебаний, а кривая С — без их учёта.

решающими), так как заключение авторов основано на сравнении результатов эксперимента с данными теоретических расчётов. В этом отношении ситуация с дифракцией нейтронов лучше, поскольку рассеяние нейтронов происходит на ядрах и измерения температурной зависимости фактора Дебая–Валлера дали бы прямое подтверждение существования нулевых колебаний, так как даже при абсолютном нуле фактор Дебая–Валлера не может быть равен единице. Но абсолютные измерения фактора Дебая–Валлера в случае нейтронов, как и для рентгеновских лучей, затруднены тем, что происходит ослабление прямого и дифрагированного пучков, в частности за счёт экстинкции, и всегда имеется диффузный фон. Кроме того, детектирующая система всегда обладает конечной разрешающей способностью, что приводит к уширению наблюдаемых дифракционных пиков и уменьшению их величины. Измерения температурной зависимости фактора Дебая–Валлера для нейтронов проводились многими авторами, но в подавляющем большинстве работ они были направлены на изучение ангармоничности колебаний, т.е. зависимости температуры Дебая от температуры. Автору настоящей статьи не известны такие измерения при низких температурах. Прямая возможность наблюдения нулевых колебаний атомов в решётке появилась в начале 1960-х годов после открытия эффекта Мёсбауэра, о чём пойдёт речь в разделе 5.

В связи с обсуждением нулевых колебаний атомов в кристаллах интересно обсудить роль нулевых колебаний в динамике электронов в полупроводниках. Рассеяние электронов на нулевых колебаниях решётки невозможно. Вблизи абсолютного нуля температуры колебания решётки находятся в своём наименьшем энергетическом состоянии и поэтому не могут передать электрону даже одного фонона. С другой стороны, энергия электрона также слишком мала для того, чтобы фононы возникли за счёт собственной энергии электрона, поэтому электрон не может рассеяться, т.е. изменить значение своего волнового вектора.

В условиях, близких к равновесным (например, при исследовании подвижности в слабых полях), вклад рассеяния на нулевых колебаниях, связанного с индуцированным испусканием фононов, также остаётся малым, даже при низких температурах. Это обусловлено вырождением электронного газа, которое делает процессы с испусканием фононов невозможными.

Однако для горячих электронов при низких температурах предположение о равномерном распределении нарушается. Вместо этого для числа фононов, играющих основную роль в рассеянии, выполняется условие $n \ll 1$. Это означает, что рассеяние с поглощением или с индуцированным испусканием фононов пренебрежимо мало, а важно лишь рассеяние, обусловленное нулевыми колебаниями [31].

Поскольку величина фактора Дебая–Валлера определяется при низких температурах практически только нулевыми колебаниями, это открывает широкие возможности для изучения потенциальной энергии, которую имеет исследуемая система. В этом отношении очень показателен эксперимент Колесникова с соавторами [32] по изучению поведения воды в нанотрубках. Вода, находящаяся в одномерных каналах, представляет большой интерес для биологии, геологии и материаловедения. Прекрасной моделью для изучения таких систем является вода, введённая в углеродные нанотрубки, так как взаимодействие молекул воды с углеродом оказывается очень слабым и мы имеем дело фактически с квазиодномерной водой. Авторы [32] измеряли упругое рассеяние нейтронов в такой системе и сравнили полученные данные с результатами таких же измерений на льде. На рисунке 4 приведены температурные зависимости среднеквадратичных колебаний молекул воды. Как видно, среднеквадратичные колебания воды в нанотрубке намного превышают таковые для льда, и это позволило авторам [31] показать, что вода в нанотрубке находится в широком двухямном потенциале (показанном на вставке рис. 4), так что делокализация молекул воды составляет примерно 2 Å.

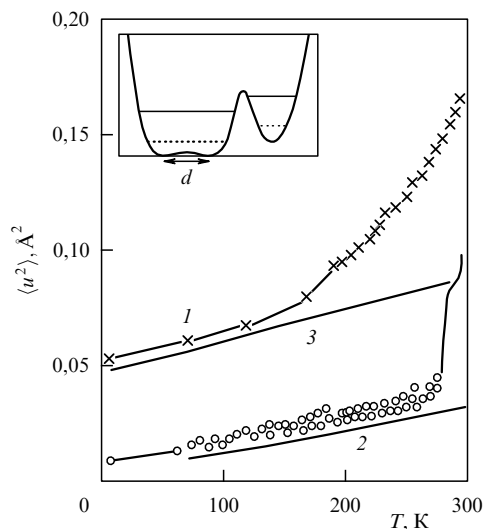


Рис. 4. Температурная зависимость среднеквадратичной амплитуды $\langle u^2 \rangle$ колебаний воды в нанотрубке (кривая 1) и во льду (кривая 2); кривая 3 — $\langle u^2 \rangle + d^2$ (по данным работы [31]).

5. Проявление нулевых колебаний в вероятности эффекта Мёссбауэра

В отличие от рассмотренных выше процессов нерезонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей кристаллами, эффект Мёссбауэра представляет собой резонансное рассеяние гамма-лучей ядрами атомов кристаллической решётки. Вследствие того что испускание (рассеяние) осуществляется ядрами атомов решётки, в этом процессе участвуют и фононы. Поэтому температурная зависимость эффекта Мёссбауэра непосредственно связана с колебаниями атомов, в которых присутствуют как тепловые, так и нулевые колебания. Как мы увидим, тем самым открывается экспериментальная возможность непосредственно доказать существование нулевых колебаний атомов.

Прежде чем обсуждать необходимые нам результаты, целесообразно напомнить некоторые теоретические аспекты эффекта Мёссбауэра.

Для ядра в кристаллической решётке затраты энергии могут идти только на возбуждение колебаний решётки (рождение или поглощение фононов). Чем меньше температура решётки, тем меньше в ней фононов и тем самым больше вероятность того, что фононы вообще не участвуют в процессах испускания и поглощения гамма-кванта ядром (фононы — это бозе-частицы, для них вероятность поглощения (испускания) пропорциональна числу имеющихся в системе частиц). Бесфононное испускание (поглощение) гамма-квантов — это и есть эффект Мёссбауэра.

Как указал Мёссбауэр в одной из своих первых работ [33], теоретическое описание эффекта практически полностью совпадает с развитой Лэмбом [34] теорией резонансного захвата медленных нейтронов в кристаллах. Относительная интенсивность f мёссбауэровской линии, т.е. доля процессов испускания (поглощения), происходящих без изменения колебательного состояния кристалла, в дебаевской модели спектра возбуждений колебаний кристалла фактически определяется уже рассмотренным нами температурным фактором Дебая–Валлера

$$f = \exp(-2W), \quad (19)$$

где

$$2W = \frac{6R}{k_B \Theta} \left[\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 \int_0^{\Theta/T} \frac{x dx}{\exp(x) - 1} \right], \quad (20)$$

Θ — дебаевская температура кристалла. Член $1/4$ в правой части (20) отражает нулевые колебания атомов кристалла, и, как видно, даже при нулевой температуре относительная интенсивность мёссбауэровской линии никогда не равна 1.

Последнее утверждение следует и из того, что интенсивность линии Мёссбауэра может быть записана, как показал Липкин [35, 36], в виде

$$f = \exp(-k_q^2 \langle x^2 \rangle), \quad (21)$$

где k_q — волновое число излучаемого кванта, $\langle x^2 \rangle$ — средний квадрат отклонения колеблющегося атома решётки от положения равновесия. При низких температурах тепловые колебания исчезают и $\langle x^2 \rangle$ определяется нулевыми колебаниями, т.е. выражение (20) никогда не равно нулю.

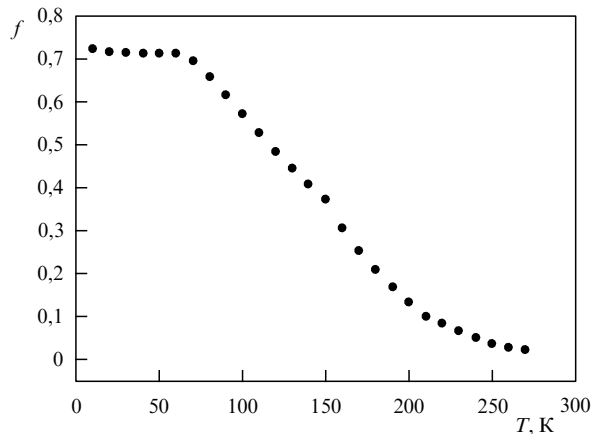


Рис. 5. Температурная зависимость фактора Дебая–Валлера на олове (по данным работы [38]).

Как мы обсуждали в разделе 4, в рентгеновских экспериментах можно лишь сравнивать результаты экспериментов с результатами расчётов. В этом отношении эффект Мёссбауэра даёт более прямое экспериментальное подтверждение существования нулевых колебаний атомов кристаллической решётки. Физическая причина указанного различия состоит в том, что длина волны γ -кванта в обоих этих экспериментах практически одинакова (для олова энергия резонанса равна 14 кэВ), но в рентгеновских экспериментах она порядка размера атома и распределение электронной плотности (структурный фактор) зависит от температуры, а в эффекте Мёссбауэра рентгеновский квант взаимодействует с ядром, размер которого на четыре порядка меньше, т.е. ядро с очень высокой точностью можно считать точечным рассеивателем.

Первые эксперименты по измерению температурной зависимости вероятности эффекта Мёссбауэра были проведены в 1960 г. Бойлем с соавторами [37]. Авторы работы [37] измерили вероятность резонансного поглощения на олове (^{119}Sn) при увеличении температуры от 120 К вплоть до точки плавления, но их основной задачей явилось исследование ангармоничности колебаний атомов в решётке, которая приводит к тому, что температура Дебая изменяется с температурой.

В 1965 г. Хохенемзер [38] провёл такие измерения при уменьшении температуры вплоть до 1,3 К. Интерес к этим экспериментам был обусловлен возможностью проверить вычисления фононного спектра, так как величина $2W$ в эффекте Мёссбауэра определяется интегралом по фононному спектру кристалла. Однако нас сейчас интересует вопрос о поведении температурного фактора в области низких температур. На рисунке 5 приведены полученные Хохенемзером результаты, которые однозначно показывают, что фактор $2W$ при низких температурах определяется не тепловыми, а нулевыми колебаниями, т.е. фактор Дебая–Валлера всегда не равен единице.

6. Наблюдение квантовых эффектов в макроскопических осцилляторах

До недавнего времени квантовое поведение наблюдалось только в атомных и субатомных структурах или в молекулах. Самым массивным объектом, у которого

наблюдались квантовые свойства, являлись фуллерены — углеродные молекулы, содержащие 60 атомов (C_{60}). В 2002 г. группой исследователей из Венского университета наблюдалась классическая дифракция фуллеренов на дифракционной решётке [39]. Однако благодаря достигнутому в последние десятилетия прогрессу в нанотехнологии появилась возможность создания и исследования макроскопических осцилляторов. Реализация квантового механического осциллятора представляет интерес для многих областей: квантовые измерения, квантовые компьютеры, квантовая оптика, физика конденсированного состояния, детекторы гравитационных волн. Возникла ситуация, в которой среднее число квантов (фотонов) в осцилляторе $\langle n_r \rangle$ исчисляется единицами. Фактически речь идёт о достижении нулевого квантового состояния механического осциллятора, и открылась возможность проверки применимости квантовой теории для макроскопических объектов, т.е. проверки самих основ физики.

Для того чтобы макроскопический осциллятор перевести в состояние со средним числом тепловых квантов $\langle n \rangle = [\exp(\hbar\Omega/k_B T) - 1]^{-1} \simeq 1$ (где Ω — резонансная частота осциллятора), т.е. в состояние, близкое к основному, необходимо, чтобы энергия колебательного кванта $\hbar\Omega$ удовлетворяла условию $\hbar\Omega > k_B T$. Это означает, что, например, для маятника, колеблющегося со звуковой частотой порядка 1 кГц, требуются температуры порядка 50 нК, которые нереально достичь, используя стандартные методы охлаждения. При реально достижимых с помощью рефрижераторов температурах порядка 50 мК частота осциллятора должна быть порядка 1 ГГц.

Существенным прогрессом в создании и исследовании макроскопических осцилляторов явились две работы, выполненные в 2005 г. [40] и 2010 г. [41].

Чтобы резонансная частота осциллятора лежала в области нескольких гигагерц, в первой из этих работ [40] учёные из Бостонского университета создали микроскопический механический осциллятор достаточно сложной формы. С помощью электронной литографии была изготовлена структура, напоминающая по форме телевизионную антенну или двустороннюю расчёску (рис. 6).

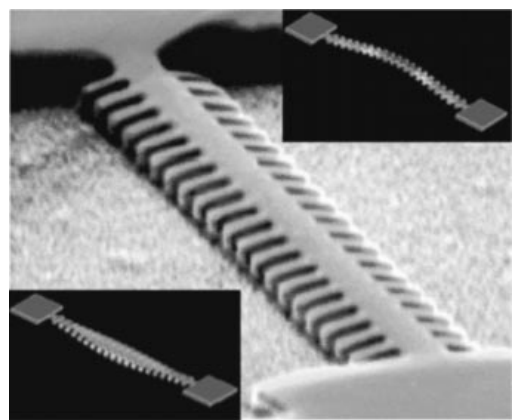


Рис. 6. Изображение механического наноосциллятора, полученное с помощью сканирующей электронной микроскопии. На вставке в верхней части рисунка — схематическое изображение низкочастотных колебаний осциллятора. На вставке в нижней части рисунка — схематическое изображение коллективной моды колебаний при больших частотах.

Длина собственно кремниевого стержня 10,7 мкм, ширина 400 нм; длина и ширина "зубчиков" составляли 500 и 200 нм соответственно; общая толщина структуры 245 нм: толщина кремния 185 нм, толщина напылённого на кремний золотого электрода 60 нм.

Подобная форма осциллятора приводит к появлению двух типов колебательных мод: низкочастотных, соответствующих колебанию конструкции как целого (см. вставку в верхней части рис. 6), и коллективных (высокочастотных, для которых собственная частота превышает 1 ГГц), когда колебания "зубчиков" в фазе вызывают колебания всей конструкции как целого (см. вставку в нижней части рис. 6). Конструкцию помещали внутрь криостата со сверхпроводящим магнитом, который мог создавать поле величиной до 16 Тл, а колебания возбуждали, пропуская переменный ток через "расчёску", в результате чего на структуру действовала сила Лоренца. Измеряя падение напряжения на золотом электроде, которое в таких условиях пропорционально смещению структуры, исследователи могли следить за колебаниями механического осциллятора. Когда частота вынуждающей силы совпадает с одной из собственных частот колебаний системы, должен иметь место резонанс, т.е. амплитуда колебаний осциллятора должна возрастать, что можно зарегистрировать по изменению максимального напряжения.

При работе в низкочастотной области (21 МГц) при температуре 60 мК исследователи видели чисто классическую картину: амплитуда колебаний осциллятора

постепенно увеличивалась по мере того, как возрастало магнитное поле (и соответственно увеличивалась сила, действующая на структуру). Такую же картину учёные наблюдали и при работе на частоте, совпадающей с собственной частотой высокочастотной коллективной моды (около 1,5 ГГц) при температуре 1 К (рис. 7).

Однако при понижении температуры до 110 мК (при такой температуре величина $k_B T$ становится сопоставимой с $h\nu$ и можно ожидать проявления квантового характера колебаний) исследователи наблюдали качественно иную картину: непрерывного изменения амплитуды колебаний при изменении поля не происходило. Вместо этого наблюдались скачки напряжения между двумя определёнными значениями (рис. 8). Подобные скачки можно интерпретировать как переходы квантового осциллятора между основным и первым возбуждённым состояниями.

Так как в эксперименте [40] измерялась абсолютная величина смещения осциллятора $|x|$, то естественно предполагать, что дискретность возбуждения осциллятора свидетельствует о дискретности его энергетических уровней, так как $|x| \propto \sqrt{E}$ (E — энергия осциллятора).

По поводу работы [40] следует сделать следующее замечание. В том же году была опубликована заметка [42], в которой выражалось сомнение относительно корректности измерения авторами [40] амплитуды и энергии колебаний осциллятора и тем самым корректности интерпретации полученных результатов. В свете этой критики следует отметить, что сам факт появления таких

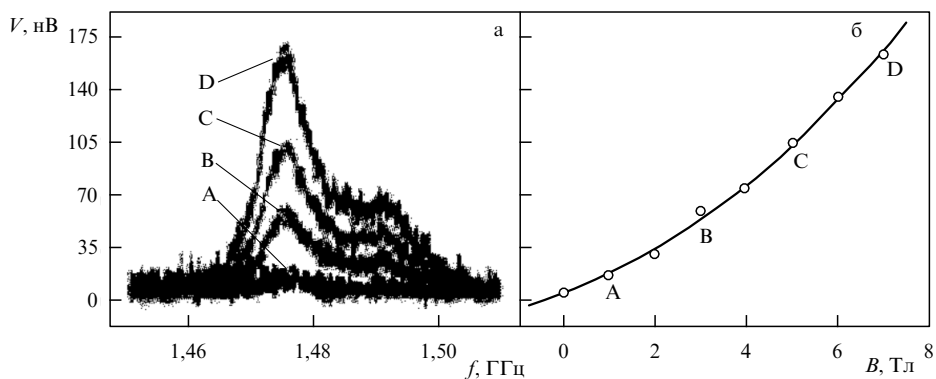


Рис. 7. Классический отклик коллективной моды колебаний резонансной структуры при температуре 1 К. (а) Зависимость максимального напряжения (и соответственно амплитуды колебаний) от частоты вынуждающей силы вблизи резонанса. (б) Зависимость максимального напряжения в резонансе от магнитного поля.

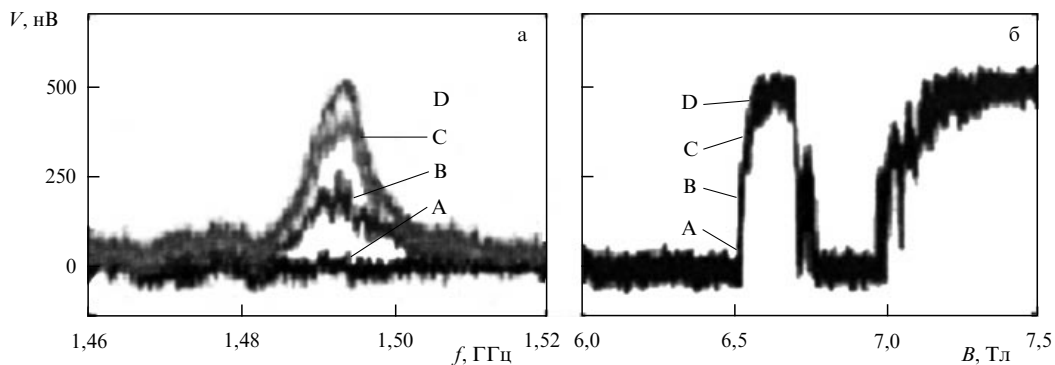


Рис. 8. Неклассическое поведение осциллятора при температуре 110 мК. (а) Зависимость максимального напряжения (и соответственно амплитуды колебаний) от частоты вынуждающей силы вблизи резонанса. (б) Зависимость максимального напряжения в резонансе от магнитного поля.

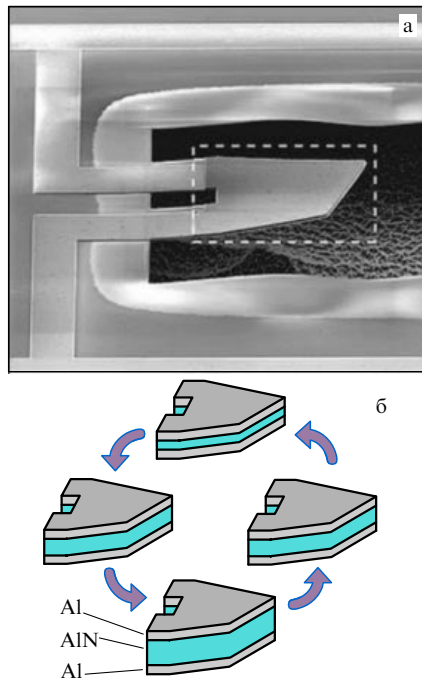


Рис. 9. (а) Изображение механического наноосциллятора, полученное с помощью сканирующей электронной микроскопии (колеблющаяся часть обведена штриховой линией). (б) Схематическое изображение дилатометрических колебаний "трамплина".

скачков напряжения при изменении магнитного поля, по-видимому, однозначно свидетельствует о наблюдении авторами [40] дискретности энергетических состояний осциллятора при низких температурах.

Авторами второй из упоминавшихся выше работ [41] (2010 г.) — физиками из Калифорнийского университета в Санта-Барбаре — была выбрана механическая система, напоминающая миниатюрный трамплин размером около 30 мкм, в центре которого находится слой пьезоэлектрического материала (нитрида алюминия), а по краям располагаются слои алюминия. При работе структура не колеблется из стороны в сторону, как обычный маятник, а сжимается и расширяется, что вызывает появление осциллирующего электрического поля (рис. 9).

Такая механическая система имела резонансную частоту 6 ГГц, что позволяло проводить измерения при сравнительно высокой температуре. Система охлаждалась криостатом растворения до температуры 25 мК. При этой температуре среднее число фононов в осцилляторе $\langle n_f \rangle < 0,07$, т.е. с вероятностью, большей 93 %, осциллятор находился в основном состоянии.

Механические колебания пьезоэлектрика генерировались электрическими сигналами и, наоборот, колебания резонатора регистрировались по сигналу с пьезоэлектрика.

Для того чтобы наблюдать интересовавшие их эффекты в механическом резонаторе, авторы связали его с квантово-механической системой — сверхпроводящим кубитом, изготовленным на основе джозефсоновского перехода (сверхпроводниками, разделёнными тонким слоем диэлектрика). Кубит является двухуровневой квантовой системой с энергетическим расстоянием между уровнями ΔE . Частота кубита $\omega = \Delta E/\hbar$ регулируется смещением, подаваемым на переход.

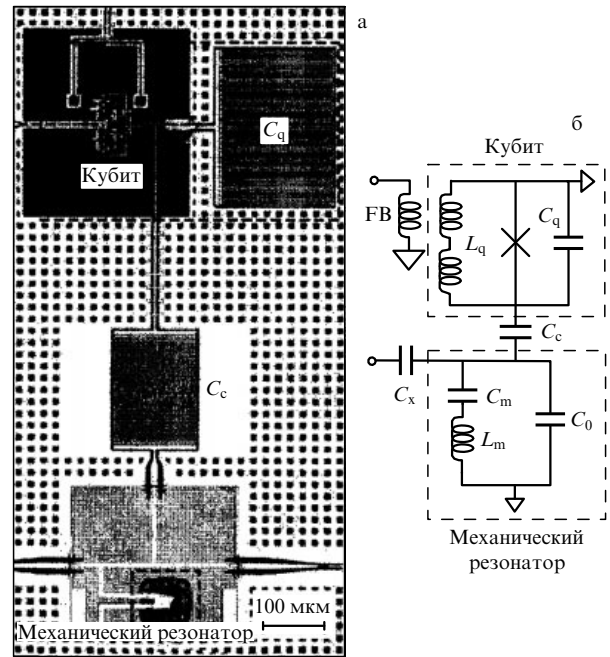


Рис. 10. (а) Оптическая микрофотография механического осциллятора, связанного с кубитом ёмкостью C_c . (б) Эквивалентная электрическая схема кубита и осциллятора. Джозефсоновский переход показан косым крестом. Параллельно переходу подсоединены ёмкость C_q и индуктивность L_q , через которую на кубит подаётся по оптоволоконной линии FB высокочастотный ток, изменяющий состояние кубита. Ёмкость C_c обеспечивает связь кубита с резонатором. Ёмкость $C_x = 0,5$ фФ используется для передачи микроволновых сигналов к резонатору.

Механический осциллятор и кубит были изготовлены на одной плате (рис. 10а). На рисунке 10б показана эквивалентная электрическая схема кубита и осциллятора.

Подавая на кубит высокочастотный импульс, авторы переводили его в возбуждённое состояние, а затем наблюдали, как это возбуждение передаётся резонатору. Таким образом была продемонстрирована возможность управления квантами колебательного движения — фононами. Уравнивая частоту кубита с частотой осциллятора, авторы научились "передавать" кванты в обе стороны.

7. Оптическое охлаждение наномеханических осцилляторов

Как указывалось в разделе 6, для наблюдения квантового поведения макроскопических осцилляторов желательно их охладить до как можно более низких температур. С помощью низкотемпературных рефрижераторов реально достигнуть температур лишь в несколько десятков милликельвинов. В последнее время значительные усилия экспериментаторов были направлены на то, чтобы достичь более сильного охлаждения с помощью оптических методов, что привело в 2011 г., как будет показано ниже, к весьма оптимистичным результатам. Теория оптического охлаждения механических осцилляторов и экспериментальные данные, полученные до 2009 г., подробно изложены в работе Городецкого с соавторами [43].

Идея оптического охлаждения основана на явлении антистоксовой люминесценции, т.е. фотолюминесценции, длина волны которой меньше длины волны возбуж-

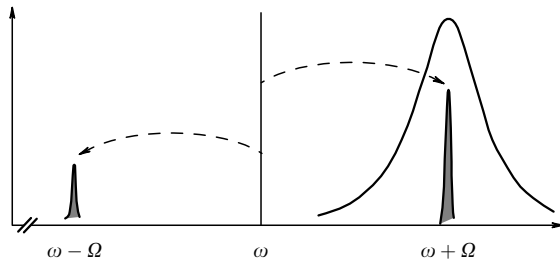


Рис. 11. Стоксова и антистоксова боковые частоты, возникающие в результате амплитудной модуляции высокочастотного сигнала тепловыми колебаниями механического осциллятора. По мере увеличения мощности накачки ширина антистоксовой компоненты возрастает.

дающего света. Так как энергия квантов увеличивается за счёт энергии теплового движения, происходит охлаждение вещества, что и называется эффектом оптического охлаждения. Лазерное охлаждение атомов хорошо известно, именно с его помощью проведены многие эксперименты по бозе-конденсации паров атомов щелочных металлов [44]. В обсуждаемых ниже работах этот метод применялся для охлаждения макроскопических систем — механических наноосцилляторов.

Если в электромеханической резонансной системе имеется подвижная часть, то её движение приводит к изменению резонансной частоты радиочастотного контура ω_0 , причём если частота накачки ω меньше резонансной частоты контура, то тепловые колебания приводят к амплитудной модуляции высокочастотной накачки и, следовательно, возникает частотная модуляция, т.е. появляются две боковые частоты $\omega \pm \Omega$, как показано на рис. 11.

Амплитуда антистоксовой компоненты больше, чем стоксовой, поэтому, покидая резонатор, антистоксова компонента уносит с собой энергию механического осциллятора (один фонон), и колебания механического осциллятора затухают, т.е. происходит параметрическое охлаждение механического осциллятора.

Так как механическое движение "закодировано" в излучаемых фотонах, то измерение интенсивности этого излучения даёт возможность судить о температуре механического осциллятора, т.е. измерение интенсивности излучения антистоксовой компоненты служит прямым методом определения тепловой заселённости механического осциллятора. Эта идея успешно была реализована авторами обсуждаемых ниже работ.

Рассмотрим вначале результаты работы [45]. Механический осциллятор представлял собой алюминиевую мембрану толщиной 100 нм и диаметром 15 мкм, находящуюся на расстоянии 50 нм над алюминиевым слоем, нанесённым на сапфировую подложку. Масса осциллирующей мембраны $m = 48$ пг, резонансная частота $\Omega = 10,56$ МГц. Эти два параллельных металлических слоя образовывали ёмкость, шунтируемую спиральной индуктивностью величиной 12 нГн, тем самым получался квазистационарный резонатор, в котором электрическое поле сконцентрировано преимущественно между обкладками конденсатора (рис. 12). Такая резонансная система обеспечивала большую электромеханическую связь за счёт того, что почти всё электрическое поле сосредоточивалось вблизи ёмкостной механической части резонатора.

Резонансная частота высокочастотного (ВЧ) контура была равна $\omega_0 = 2\pi \times 7,54$ ГГц. Система охлаждалась

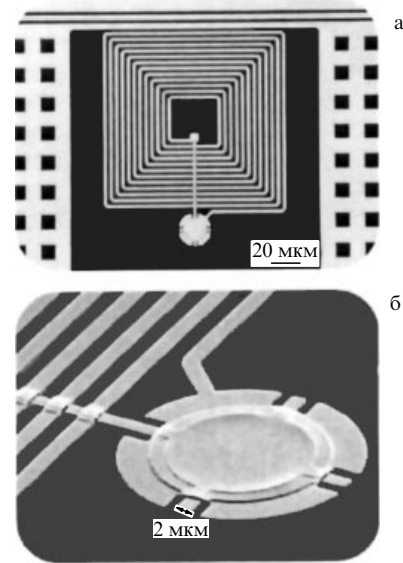


Рис. 12. (а) Фотография микроволнового резонатора, образованного спиральной индуктивностью и ёмкостью, состоящей из двух параллельных дисков. (б) Фотография подвижной мембраны ёмкости.

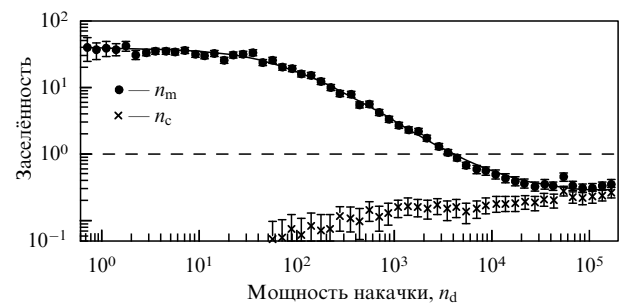


Рис. 13. Зависимость среднего числа механических квантов (фононов) в осцилляторе от числа фотонов в резонаторе (мощности накачки). При начальной температуре $T = 20$ мК, при которой среднее число фононов $n_m = [\exp(\hbar\Omega_m/k_B T) - 1]^{-1} = 40$, антистоксово излучение за счёт сильного взаимодействия фотонов с фононами охлаждает механический осциллятор до температуры основного квантового состояния, при которой $n_m = 0,3 \pm 0,05$. При этом число тепловых фотонов n_c в резонаторе равняется 4000.

рефрижератором растворения до температуры 15 мК, при которой алюминий становится сверхпроводником, поэтому добротность ВЧ-контура была достаточно высокой. Среднее число фононов при такой температуре $n_m = [\exp(\hbar\Omega/k_B T) - 1]^{-1} \approx 30$. При подаче ВЧ-накачки в резонансный контур механический осциллятор охлаждался практически до температуры основного квантового состояния, при этом число фотонов в резонаторе составляло $n_c = 4000$ (рис. 13).

Тепловое движение мембраны создаёт хорошо разрешимый пик на фоне шумового микроволнового сигнала.

Площадь под резонансной кривой спектральной плотности смещения S_n пропорциональна эффективной температуре механической моды, т.е. измерение мощности шума позволяет однозначно связать эту площадь с температурой механического осциллятора.

С увеличением подводимой к резонатору мощности оптической накачки снижается "подложка", ширина резонанса увеличивается, а площадь под пиком уменьшается, т.е. добротность осциллятора сильно умень-

шается по мере уменьшения температуры (см. вставки на рис. 15). Это обусловлено тем, что подаваемое на резонатор излучение не только охлаждает механический осциллятор, но и одновременно демпфирует его движение. Как было показано в работе [46], добавочное трение в резонаторе с подвижным зеркалом возникает из-за того, что при смещении зеркала давление на него возникает не мгновенно, а лишь через время, равное времени установления колебаний в резонаторе, и при отрицательной величине вносимой жёсткости, обусловленной давлением излучения, возникает дополнительная диссипация (диссипативный пондеромоторный эффект электромагнитного излучения).

На рисунке 13 показано, как изменяется спектральная плотность смещений мембраны по мере увеличения мощности накачки, и в результате оптического охлаждения системы осциллятор практически переходит в основное квантовое состояние.

Другой эксперимент [47] проводился совместной группой исследователей из Калифорнийского технологического института и Венского университета с так называемым оптомеханическим резонатором [48]. Как показано на рис. 14, механическим осциллятором служила тонкая кремниевая полоска с рядом отверстий

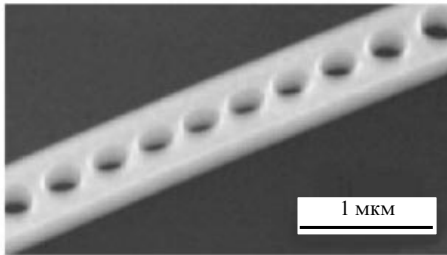


Рис. 14. Кремниевая полоска, служащая одновременно механическим вибратором и оптическим резонатором волноводного типа.

вдоль оси, поэтому полоска одновременно служила оптическим резонатором волноводного типа (резонансная частота вибратора 3,68 ГГц, частота лазерной накачки 195 ТГц).

Модуляция света происходит за счёт того, что тепловые колебания полоски вызывают её удлинение и тем самым изменение частоты светового резонатора, т.е. происходит частотная модуляция сигнала накачки.

На рисунке 15 приведён результат эксперимента — зависимость заселённости осциллятора от мощности накачки. Эти значения определялись, как и в рассмотренном выше эксперименте, по площади лоренцевского шумового спектра (в единицах $\text{м}^2 \text{Гц}^{-1}$).

Как видно из приведённых результатов, стартуя с достаточно высокой температуры, авторам удалось достичь состояния макроскопического осциллятора со средним числом фононов $\langle n \rangle = 0,85 \pm 0,04$.

Как показывают теоретические расчёты, достичь основного состояния, стартуя с температуры T , можно только в том случае, если добротность механического осциллятора Q_m и ширина ВЧ-резонатора $\Delta\omega$ удовлетворяют соотношению $\hbar\Delta\omega \geq k_B T/Q_m$. Полученные в работе [47] параметры электрооптического резонатора таковы, что становится реальным прийти к квантовому состоянию механического осциллятора, стартуя с комнатной температуры. Естественно, это открывает большие возможности для широкого круга экспериментов с макроскопическими осцилляторами.

8. Заключение

Нулевые колебания являются одним из фундаментальных следствий квантово-механического описания законов природы, полностью противоречащего классической физике. Как указывалось выше, нулевые колебания свойственны любой частице, находящейся в потенциальной яме, и поэтому их экспериментальное обнаружение имеет, конечно, принципиальное значение. Наиболее ярким проявлением нулевых колебаний является тот экспериментальный факт, что гелий при нормальных условиях существует в жидкой фазе при температуре вплоть до абсолютного нуля.

Ещё одним удивительным следствием наличия нулевых колебаний является утверждение о невозможности существования строго одномерных или двумерных кристаллов (Л.Д. Ландау, Р. Пайерлс) — даже при абсолютном нуле температуры нулевые колебания атомов оказываются настолько сильными, что они разрушают дальний порядок в их расположении. Конечно, отсюда не следует запрет на существование квазиодномерных и квазидвумерных кристаллов, в которых взаимодействие между периодическими цепочками атомов (или соответственно слоями) мало по сравнению со взаимодействием атомов внутри цепочки или слоя.

Как следует из приведённых выше результатов экспериментов, существование нулевых колебаний однозначно подтверждается исследованиями температурной зависимости фактора Дебая – Валлера в опытах с рассеянием кристаллами рентгеновского излучения, нейтронов и гамма-квантов. Особый интерес в последние годы представляют эксперименты по наблюдению квантовых эффектов в макроскопических механических осцилляторах. Успехи нанотехнологии позволили создать механические резонансные системы с собственной частотой,

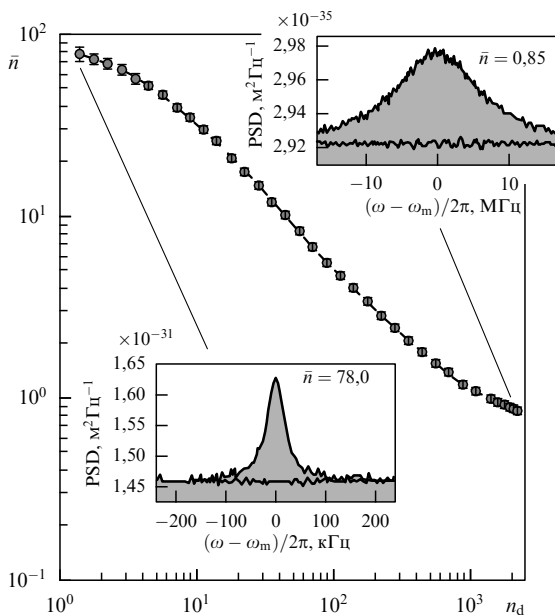


Рис. 15. Зависимость заселённости осциллятора от мощности накачки. На вставках показаны результаты измерения мощности шума PSD (Power Spectral Density) при малой и большой мощности оптической накачки.

лежащей в гигагерцевой области, так что при милликельвиновых температурах эти осцилляторы находятся в нулевом состоянии и отчётливо наблюдаются квантовые переходы между основным и первым возбуждённым состояниями. В рассмотренных экспериментах впервые удалось наблюдать квантовое поведение механического осциллятора микрометровых размеров.

Несмотря на то что нулевые колебания квантово-механической системы были предсказаны в первые годы становления квантовой механики, в 20-х годах прошлого столетия, они до сих пор являются как объектом интенсивных научных исследований (см., например, работы [49–52]), так и инструментом исследования динамики различных систем.

Я глубоко признателен А.О. Раевскому за многочисленные плодотворные обсуждения всех рассмотренных в работе вопросов.

Список литературы

1. Heisenberg W Z. *Phys.* **33** 879 (1925)
2. Блохинцев Д И *Основы квантовой механики* (М.: Высшая школа, 1961) с. 151
3. Жданов Г С *Физика твердого тела* (М.: Изд-во Московского университета, 1961) с. 35
4. Мигдал А Б *Квантовая физика для больших и маленьких* (Библиотека "Квант", Вып. 75) (М.: Наука, 1989)
5. Фейнберг Е Л, в кн. *Физический энциклопедический словарь* (Гл. ред. Б А Введенский, Б М Вул) Т. 3 (М.: Советская энциклопедия, 1963) с. 448
6. Левич В Г, Вдовин Ю А, Мямлин В А *Курс теоретической физики* Т. 2 (Под ред. В Г Левича) (М.: Наука, 1971) § 10
7. Савельев И В *Курс общей физики* Т. 3 (М.: Наука, 1982) § 27 [Savel'ev I V *Physics, A General Course* Vol. 3 (Moscow: Mir, 1981)]
8. Иродов И Е *Квантовая физика* (М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2002) § 4.4
9. Мартинсон Л К, Смирнов Е В *Квантовая физика* (М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004)
10. Mostepanenko V M, Trunov N N *The Casimir Effect and Its Applications* (Oxford: Clarendon Press, 1997)
11. Барсуков О А, Ельяшевич М А *Основы атомной физики* (М.: Научный мир, 2006)
12. Дергобузов К А, <http://teachmen.csu.ru>
13. Planck M "La loi du rayonnement noir et l'hypothèse des quantités élémentaires d'action", in *La Théorie du Rayonnement et les Quanta. Rapports et Discussions de la Réunion tenue à Bruxelles, du 30 Octobre au 3 Novembre 1911, Sous les Auspices de M.E. Solvay* (Paris: Imprimerie Gauthier-Villars, 1912) pp. 93–132
14. Френкель В Я, Явелов Б Е *Эйнштейн: изобретения и эксперимент* 2-е изд. (М.: Наука, 1990) Гл. 4
15. Milonni P W, Shih M-L *Am. J. Phys.* **59** 684 (1991)
16. Milonni P W *Phys. Scripta* **T21** 102 (1988)
17. Milonni P W *The Quantum Vacuum: an Introduction to Quantum Electrodynamics* (Boston: Academic Press, 1994)
18. Einstein A, Stern O *Ann. Physik* **40** 551 (1913) [Эйнштейн А, Штерн О, в кн. Эйнштейн А *Собрание научных трудов* Т. 3 (М.: Наука, 1966) с. 314–322]
19. *La Structure de la Matière. Rapports et Discussions du Conseil de Physique tenu à Bruxelles du 27 au 31 Octobre 1913, Sous les Auspices de l'Institut International de Physique Solvay* (Paris: Gauthier-Villars et cie, 1921)
20. Nernst W *Verhand. Deutschen Phys. Gesellschaft.* **18** 83 (1916)
21. Mulliken R S *Nature* **114** 349 (1924)
22. Jenkins F A, de Laszlo H *Proc. R. Soc. London* **122** 103 (1929)
23. Jenkins F A, McKellar A *Phys. Rev.* **42** 464 (1932)
24. Laue M *Munchen Sitzungsber. Math. Phys. Kl.* 363–373 (1912)
25. Debye P *Verhand. Deutschen Phys. Gesellschaft.* **15** 678, 738, 867 (1913)
26. Debye P *Ann. Physik* **43** 49 (1913)
27. Waller I "Theoretische Studien zur Interferenz- und Dispersions theorie der Röntgenstrahlen", Dissertation (Upsala, 1925)
28. James R W, Firth E M *Proc. R. Soc. London A* **117** 62 (1927)
29. James R W, Waller I, Hartree D R *Proc. R. Soc. London A* **118** 334 (1928)
30. James R W, Brindley G W, Wood R G *Proc. R. Soc. London A* **125** 401 (1929)
31. Ridley B K *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford: Clarendon Press, 1982) [Ридли Б *Квантовые процессы в полупроводниках* (М.: Мир, 1986)]
32. Kolesnikov A I et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 035503 (2004)
33. Mössbauer R L Z. *Phys.* **151** 124 (1958)
34. Lamb W E (Jr.) *Phys. Rev.* **55** 190 (1939)
35. Lipkin H J *Ann. Physics* **9** 332 (1960)
36. Lipkin H J *Ann. Physics* **18** 182 (1962)
37. Boyle A J F et al. *Proc. Phys. Soc. London A* **77** 129 (1961)
38. Hohenemser C *Phys. Rev.* **139** A185 (1965)
39. Brezger B et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 100404 (2002)
40. Gaidarzhy A et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 030402 (2005)
41. O'Connell A D et al. *Nature* **464** 697 (2010)
42. Schwab K C et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 248901 (2005)
43. Городецкий М Л и др. *Нанотехнологии: разработка, применение — XXI век* (1) 56 (2009)
44. Phillips W D *Rev. Mod. Phys.* **70** 721 (1998); Филипс У Д *УФН* **169** 305 (1999)
45. Teufel J D et al. *Nature* **475** 359 (2011)
46. Брагинский В Б, Манукин А Б *ЖЭТФ* **52** 986 (1967) [Braginskii V B, Manukin A B *Sov. Phys. JETP* **25** 653 (1967)]
47. Chan J et al. *Nature* **478** 89 (2011); arXiv:1106.3614
48. Marquardt F et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 093902 (2007)
49. Лесовик Г Б *УФН* **168** 155 (1998) [Lesovik G B *Phys. Usp.* **41** 145 (1998)]
50. Giovanelli R, Orefice A *Hyperfine Interact.* **131** 51 (2000)
51. Халили Ф Я *УФН* **173** 301 (2003) [Khalili F Ya *Phys. Usp.* **46** 293 (2003)]
52. Astrakharchik G E, Combescot R, Pitaevskii L P *Phys. Rev. A* **76** 063616 (2007)

Zero point energy and zero point oscillations: how they are detected experimentally

Yu.M. Tsipenyuk

*P.L. Kapitza Institute for Physical Problems, Russian Academy of Sciences,
ul. Kosygina 2, 119334 Moscow, Russian Federation
Tel. +7 (499) 137 65 77. E-mail: tsip@kapitza.ras.ru;
Moscow Institute of Physics and Technology (State University),
Institutskii per. 9, 141790 Dolgoprudnyi, Moscow region, Russian Federation*

The zero point energy of a system in a potential well is reviewed as a concept with some history of development behind it, and a discussion is given of how it can be detected experimentally from the electronic-vibrational spectrum of molecules with different isotopes (isotope effect). Also discussed is how the zero point oscillations of crystal lattice atoms show up in the diffraction of X-rays and neutrons from crystals and in the temperature dependence of the Mössbauer effect probability. Other topics include measuring zero point oscillations in a nanotube to determine the form of the potential energy of the system; the role of zero point oscillations in the dynamics of electrons in semiconductors; experiments on the optical cooling and quantum behavior of mechanical oscillators.

PACS numbers: **03.65.-w**, 03.65.Ge, 61.05.cp, 61.05.Qr
Bibliography — 52 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **182** (8) 855–867 (2012)

DOI: 10.3367/UFNr.0182.201208e.0855
Received 4 February 2011, revised 27 December 2011
Physics – Uspekhi **55** (8) (2012)