ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» Институт физики

На правах рукописи

Кашапов Рашид Наилевич

Дисперсионные силы в слоистых проводящих структурах

01.04.02 — теоретическая физика

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Казань – 2020

Работа выполнена на кафедре теории относительности и гравитации $\Phi \Gamma AO Y BO$ «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Научный руководитель:

Хуснутдинов Наиль Рустамович

доктор физико-математических наук, профессор кафедры теории относительности и гравитации,

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)

федеральный университет»

Официальные оппоненты:

Марачевский Валерий Николаевич

доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой механики ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский

государственный университет»

Пироженко Ирина Георгиевна

кандидат физико-математических наук доцент, начальник сектора Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова

«Объединенный институт ядерных исследований»

Ведущая организация:

ФГАОУ ВО «Ульяновский государственный

университет»

Защита состоится «24» декабря 2020 г. в 15 часов 40 минут на заседании диссертационного совета КФУ.01.03 при ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по адресу: г. Казань, ул. Кремлёвская, 16A, ауд. 110

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке $\Phi\Gamma$ АОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по адресу: г. Казань, ул. Кремлёвская, 18, корп. 6

Автореферат разослан «___ » _____ 20__ г. и размещён на официальном сайте Казанского (Приволжского) федерального университета: http://kpfu.ru/validation/obyavleniy ϵ o-zaschitah-dissertacij

Учёный секретарь диссертационного совета, кандидат физико-математических наук

of the same of the

В.А. Попов

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Между двумя электрически нейтральными атомами действует сила притяжения, природа которой связана с взаимодействием наведенных дипольных моментов атомов друг с другом. При малых расстояниях энергия взаимодействия обратно пропорциональна шестой степени расстояния между атомами [1], и такие силы принято называть силами Ван дер Ваальса. Учет запаздывания взаимодействия приводит к тому, что на бо́льших расстояниях энергия взаимодействия обратно пропорциональна седьмой степени расстояния между атомами [2], и соответствующие силы принято называть силами Казимира. Общее выражение для энергии взаимодействия атомов, справедливое как при больших, так и малых расстояниях получено Казимиром и Полдером [2]. Поскольку силы Ван дер Ваальса и Казимира имеют общую природу, то будем говорить о единой дисперсионной силе или энергии Ван дер Ваальса/Казимира (ВдВ/К).

Взаимодействие BдB/K является доминирующим механизмом взаимодействия электрически нейтральных и не обладающих собственными мультипольными моментами атомов и молекул на расстояниях $\sim 0.3 \div 500$ нм. Силы BдB/K имеют квантовую природу и убывают с расстоянием по степенному закону [3,4]. В молекулярных газах, жидкостях, жидких кристаллах, коллоидных растворах и твердых телах силы BдB/K описывают лишь часть межмолекулярного взаимодействия.

На макроуровне взаимодействие BдB/K приводит к притяжению между любыми электронейтральными телами и адсорбции атомов или молекул на поверхности материалов. В простейшем случае идеально проводящих пластин сила притяжения F на единицу площади S пластин, находящихся на расстоянии a, имеет следующий вид [3]:

$$\frac{F}{S} = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{a^4},\tag{1}$$

где c — скорость света и \hbar — постоянная Планка. Дальнейшие исследования выявили зависимость силы BдB/K как от формы тел, так и от температуры, проводимости, диэлектрической проницаемости, химического потенциала, шероховатости и других параметров [3,4]. Показано, что силы BдB/K играют важную роль не только в физике, инженерии, химии, но также и в биологии [6]. В связи с открытием новых материалов таких как графен, силицен, фосфорен, германен, топологические изоляторы, вейлевские полуметаллы и т.д. дискутируется вопрос об отталкивающей силе BдB/K в таких материалах [7].

Измерение силы BдB/K является сложной инженерной задачей, поскольку она принимает сколь нибудь заметное значение только на расстояниях меньших 500 нм. Современное состояние экспериментов по измерению сил BдB/K имеется в обзорах [8, 9]. Последние прецизионные эксперименты хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями поведения сил BдB/K [9].

Появление нанотехнологий в последние десятилетия привело к активному исследованию физических явлений на наномасштабах и открытию новых материалов. На наномасштабах силы BдB/K играют важную роль, и поэтому исследование зависимости таких сил от различных параметров и условий является актуальной задачей.

Целью данной работы является исследование взаимодействия BдB/K в системе с произвольным числом проводящих плоскостей.

Для достижения цели диссертационной работы были поставлены следующие задачи:

- 1) получить выражение для энергии ВдВ/К набора проводящих плоскостей;
- получить выражение для силы, действующей на каждую плоскость в наборе проводящих плоскостей;
- получить выражение для энергии взаимодействия атома с набором проводящих плоскостей;
- 4) провести анализ полученных выражений для малых и больших расстояний между плоскостями и для разного количества плоскостей в наборе;
- на основе полученных выражений для энергии BдB/K вычислить энергию связи между слоями графита и сравнить полученные данные с экспериментальными;
- 6) рассмотреть влияние температуры на энергию BдB/K для набора проводящих плоскостей.

Объектами исследования являются слоистые структуры, состоящие из проводящих плоскостей, в частности, набор плоских графенов.

Научная новизна работы состоит в получении впервые следующих научных результатов:

- Для набора равноотстоящих проводящих плоскостей получена зависимость энергии ВдВ/К от числа плоскостей и их проводимости.
- Получено выражение для силы BдB/K, действующей на каждую плоскость в наборе проводящих плоскостей. Показано быстрое уменьшение амплитуды силы при удалении от крайних плоскостей.
- 3) Исследованы свободная энергия BдB/K и энергия адсорбции атома набором проводящих плоскостей. Получены главные низкотемпературные поправки.
- 4) Показано, что в наборе проводящих плоскостей, при малых расстояниях d между ними, энергия ВдВ/К пропорциональна $d^{-5/2}$.

5) На основе полученной зависимости энергии BдB/K от числа плоскостей и проводимости показано, что энергия связи между слоями графита совпадает по порядку величины с энергией BдB/K.

Теоретическая и практическая значимость. Решение рассматриваемых в данном диссертационном исследовании проблем актуально как для фундаментальной физики, так и для дальнейшего развития нанотехнологий. Общеизвестно, что главной тенденцией нанотехнологий является уменьшение размеров используемых устройств. Последнее повышает роль различных квантовых эффектов, таких как силы Ван дер Ваальса и Казимира. Полученные в диссертации результаты представляют интерес в физике адсорбции молекул, для уточнения структуры графита и взаимодействия между слоями графенов.

Методология и методы исследования. Методология диссертационного исследования базируется на результатах трудов по изучению казимировского взаимодействия и состоит в получении дисперсионных уравнений для собственных частот системы параллельных плоскостей путем решения уравнений Максвелла. Методами комплексного анализа аналитически находятся выражения для энергии и силы ВдВ/К для системы параллельных плоскостей. С использованием метода разрежения среды Лифшица аналитически вычисляется энергия взаимодействия атома или молекулы с совокупностью параллельных проводящих плоскостей (энергия Казимира–Полдера).

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1) Разработан метод вычисления энергии Ван дер Ваальса/Казимира (ВдВ/К) для набора проводящих паралельных плоскостей. На его основе получены аналитические выражения для энергии ВдВ/К набора проводящих плоскостей и силы действующей на отдельную плоскость при нулевой температуре.
- 2) Получено выражение, описывающее рост энергии BдB/K с увеличением числа плоскостей. В случае конечной проводимости для малых межплоскостных расстояний d получено, что энергия BдB/K пропорциональна $d^{-\frac{5}{2}}$.
- 3) Для системы проводящих плоскостей получены общие выражения для свободной энергии BдB/K и Казимира-Полдера, которые зависят от числа плоскостей и их проводимости. Для энергии Казимира-Полдера в случае одной проводящей плоскости получено низкотемпературное разложение. Для конечной проводимости низкотемпературная поправка к энергии Казимира-Полдера пропорциональна T^2 , а для идеальной проводимости эта поправка совпадает с известной зависимостью T^4 .

Апробация. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях и научных семинарах: Международная научная конференция по гравитации, астрофизике и космологии (Международная летняя школа по гравитации и космологии) (Казань, КФУ, 2014), Международная научная конференция "Quantum Field

Theory and Gravity" 2014 (Томск, 2014), Международная научная конференция "9th Alexander Friedman International Seminar 3rd Symposium on the Casimir Effect" (Санкт-Петербург, 2015), Международная научная конференция "XII th International Conference on Gravitation, Astrophysics and Cosmology" (Москва, РУДН, 2015), Международная научная конференция "Quantum Field Theory and Gravity 2016" (Томск, 2016), Международная народная научная конференция "Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics" (UFABC, Rio de Janeiro, Brasil, 2016), семинары кафедры теории относительности и гравитации Казанского федерального университета.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Основные результаты диссертации получены лично автором.

Публикации. Основные результаты работы были напечатаны в 6 статьях, опубликованных в журналах списка ВАК [A1-A6] и 3-х тезисах и трудах конференций [A7-A9].

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 129 страниц, включая 21 рисунок. Список литературы содержит 96 наименований.

Основное содержание работы

Во Введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, а также отражены её научная новизна, теоретическая и практическая значимость, основные защищаемые положения. Кроме того, приводятся сведения о публикациях автора и апробации результатов.

Первая глава посвящена обзору научной литературы, в котором показано современное состояние данной области науки. Представлены различные подходы для вычисления энергии и силы BдB/K. Детально изучается метод вычисления энергии BdB/K через вакуумные осцилляции электромагнитного поля и рассматривается постановка граничных условий. Описывается процедура преобразования суммы по модам нулевых колебаний (3) в интеграл от функции, определяющей спектр частот ω нулевых колебаний электромагнитного поля.

Фундаментальным является подход, основанный на рассмотрении энергии вакуумных осцилляций электромагнитного поля

$$\mathcal{E} = \sum_{J} \frac{1}{2} \hbar \omega_{J},\tag{2}$$

где подразумевается суммирование по дискретным и/или интегрирование по непрерывным переменным. Частоты колебаний ω_J электромагнитного поля содержат всю информацию о рассматриваемой системе.

Выражение (2) расходится, и для получения конечной величины необходимо провести соответствующую перенормировку. Одним из разработанных методов проведения перенормировки является метод обобщенной дзета-функции [3], используемый в диссертации. В рамках этого подхода расходящееся выражение (2) заменяется на мероморфную функцию

$$\mathcal{E}(s) = \Omega^{2s} \sum_{J} \frac{1}{2} \hbar \omega_J^{1-2s} \tag{3}$$

комплексной переменной s с последующим взятием предела $s \to 0$. Параметр Ω с размерностью частоты введен для сохранения размерности энергии величины $\mathcal{E}(s)$.

Проводимость материала является одной из важных характеристик, влияющих на взаимодействие BдB/K. В связи с открытием двумерных проводящих материалов [10] становится актуальным описание сил BдB/K в системах, содержащих такие материалы. В общем случае проводимость имеет тензорную структуру, пространственную и временную дисперсии, зависит от температуры, химического потенциала и других параметров системы. Мощным методом вычисления тензора проводимости таких материалов является метод, основанный на тензоре поляризации в 2+1 — мерной квантовой электродинамике [11,12].

Приведены основные этапы регуляризации и перенормировки методом обобщенной дзета-функции. Для плоских границ перенормированное выражение для энергии на единицу площади плоскостей имеет следующий вид:

$$\mathcal{E}_{\mathsf{C}} = \frac{\hbar}{(2\pi)^3} \iint d^2k \int_0^\infty d\xi \ln\left(\frac{\Psi(\mathrm{i}\xi, \boldsymbol{k}, d)}{\Psi(\mathrm{i}\xi, \boldsymbol{k}, \infty)}\right),\tag{4}$$

где d – расстояние между плоскостями, и ${\bf k}$ – волновой вектор. Спектр колебаний электромагнитного поля определяется из условия $\Psi(\omega,{\bf k},d)=0,\ \omega={\rm i}\xi.$ Функция $\Psi(\omega,{\bf k},d)$ определяется из граничных условий,

Во **второй главе** рассматриваются уравнения Максвелла для системы \mathcal{N} параллельных проводящих плоскостей (см. Рис. 1) и граничные условия на плоскостях. Решения вакуумных уравнений Максвелла разделяются на две независимые моды – поперечно-электрическую (TE):

$$\mathbf{E}_{\mathsf{TE}} = \frac{\omega b_z(z)}{ck_{\perp}^2} \left(-k_y, k_x, 0\right) e^{\mathrm{i}(k_x x + k_y y - \omega t)},$$

$$\mathbf{B}_{\mathsf{TE}} = \left(\frac{\mathrm{i}k_x}{k_{\perp}^2} b_z'(z), \frac{\mathrm{i}k_y}{k_{\perp}^2} b_z'(z), b_z(z)\right) e^{\mathrm{i}(k_x x + k_y y - \omega t)},$$
(5)

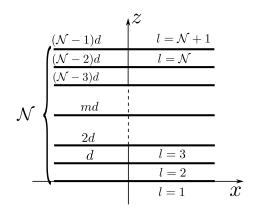


Рис. 1: На рисунке схематично приведена система, состоящая из набора проводящих плоскостей, где d – расстояние между плоскостями, \mathcal{N} – число плоскостей. Пространство разделяется плоскостями на $\mathcal{N}+1$ области.

и поперечно-магнитную (ТМ):

$$\mathbf{E}_{\mathsf{TM}} = \left(\frac{\mathrm{i}k_x}{k_\perp^2} e_z'(z), \frac{\mathrm{i}k_y}{k_\perp^2} e_z'(z), e_z(z)\right) e^{\mathrm{i}(k_x x + k_y y - \omega t)},$$

$$\mathbf{B}_{\mathsf{TM}} = \frac{\omega e_z(z)}{ck_\perp^2} \left(k_y, -k_x, 0\right) e^{\mathrm{i}(k_x x + k_y y - \omega t)}.$$
(6)

Здесь $k_{\perp}^2=k_x^2+k_y^2$, а функции $e_z(z)$ и $b_z(z)$ удовлетворяют вакуумному волновому уравнению $e_z''+(\omega^2/c^2-k_{\perp}^2)e_z=0$.

На каждой плоскости выполняется закон Ома $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, что приводит к следующим граничным условиям на каждой плоскости для ТМ моды:

$$[e'_z]_{nd} = 0, [e_z]_{nd} = -\frac{4\pi\sigma}{\xi} e'_z(nd),$$
 (7)

где

$$e_z = C_{2l-1}e^{\kappa z} + C_{2l}e^{-\kappa z}.$$

Здесь $l=\overline{1,\mathcal{N}+1}$ — номер области (см. Рис. 1), $n=\overline{0,\mathcal{N}-1}$ — номер плоскости, σ — проводимость плоскости, d — расстояние между плоскостями и $\kappa=\sqrt{k_x^2+k_y^2+\xi^2/c^2}$. Квадратные скобки обозначают скачок функции: $[f(z)]_a=f(a-0)-f(a+0)$. В областях 1 и $\mathcal{N}+1$ (ниже и выше набора плоскостей) функция e_z имеет вид

$$e_z = C_1 e^{\kappa z}, \ e_z = C_{2\mathcal{N}+2} e^{-\kappa z}.$$

Совокупность граничных условий на \mathcal{N} плоскостях представляет собой систему, состоящую из $2\mathcal{N}$ линейных однородных уравнений для определения коэффициентов C_m . Условием существования решения является равенство нулю определителя Ψ этой системы, входящего в формулу для энергии (4). Приводя определитель к блочнодиагональному виду, и используя представление матриц в форме Жордана, получаем

$$\Psi_{\mathsf{TM}} = 2^{\mathcal{N}-1} \frac{e^{-\kappa d(\mathcal{N}-1)}}{f^{\mathcal{N}-2}} \left(e^{-\kappa d} \frac{1 - f^{2(\mathcal{N}-1)}}{1 - f^2} - \frac{1 + \frac{\eta \kappa}{\lambda}}{f} \frac{1 - f^{2\mathcal{N}}}{1 - f^2} \right),\tag{8}$$

где $f=\operatorname{ch}\kappa d+\frac{\eta\kappa}{\xi}\operatorname{sh}\kappa d+\sqrt{(\operatorname{ch}\kappa d+\frac{\eta\kappa}{\xi}\operatorname{sh}\kappa d)^2-1}$ и $\eta=2\pi\sigma/c.$

В случае ТЕ моды граничные условия имеют следующий вид:

$$[b_z]_{nd} = 0, [b'_z]_{nd} = \frac{4\pi\sigma\xi}{c^2}b_z(nd).$$
 (9)

Аналогичные вычисления для моды TE приводят к выражению (8) с заменой $\frac{\eta \kappa}{\xi} \to \frac{\eta \xi}{\kappa}$.

Подставляя полученные выражения в (4), получаем энергию BдB/K в виде суммы энергий TM и TE мод:

$$\mathcal{E}_{\mathsf{C}}^{(\mathcal{N})} = \frac{\hbar c}{d^3} \left\{ Q_{\mathsf{TM}}^{(\mathcal{N})}(\eta) + Q_{\mathsf{TE}}^{(\mathcal{N})}(\eta) \right\},\tag{10}$$

где

$$Q_{\mathsf{TM}}^{(\mathcal{N})}(\eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty y^2 dy \int_0^1 dx \ln F_{\mathcal{N}}\left(\frac{\eta}{x}, y\right),$$

$$Q_{\mathsf{TE}}^{(\mathcal{N})}(\eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty y^2 dy \int_0^1 dx \ln F_{\mathcal{N}}\left(\eta x, y\right),$$
(11)

И

$$F_{\mathcal{N}}(t,z) = -\frac{e^{-z(\mathcal{N}-1)}}{(1+t)^{\mathcal{N}}f^{\mathcal{N}-2}} \left(e^{-z} \frac{1 - f^{2(\mathcal{N}-1)}}{1 - f^2} - \frac{1 + t}{f} \frac{1 - f^{2\mathcal{N}}}{1 - f^2} \right). \tag{12}$$

Далее рассмотрен случай постоянной проводимости. Для систем, состоящих из 2-х, 3-х и 4-х плоскостей с разными межплоскостными расстояниями, энергия не представляет собой линейную суперпозицию энергий пар плоскостей и является сложной функцией межплоскостных расстояний.

Рассмотрены различные предельные случаи. В случае идеальной проводимости для двух плоскостей энергия совпадает с классическим результатом Казимира, а для $\mathcal N$ плоскостей энергия Казимира является суммой энергий Казимира соседних плоскостей. В случае малой проводимости $\eta=2\pi\sigma/c\ll 1$ энергия оказывается пропорциональна проводимости, и основной вклад вносит ТМ мода. ТЕ мода дает пренебрежимо малый вклад, пропорциональный квадрату проводимости.

Получено выражение для силы Казимира, действующей на некоторую плоскость m в наборе из ${\mathcal N}$ плоскостей:

$$\mathcal{F}_{\mathsf{C}}^{(m,\mathcal{N})} = \frac{\hbar c}{d^4} \left\{ U_{\mathsf{TM}}^{(m,\mathcal{N})}(\eta) + U_{\mathsf{TE}}^{(m,\mathcal{N})}(\eta) \right\},\tag{13}$$

где оба вклада

$$U_{\mathsf{TM}}^{(m,\mathcal{N})}(\eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty y^2 dy \int_0^1 dx G_{m,\mathcal{N}}\left(\frac{\eta}{x},y\right),$$

$$U_{\mathsf{TE}}^{(m,\mathcal{N})}(\eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty y^2 dy \int_0^1 dx G_{m,\mathcal{N}}\left(\eta x,y\right),$$
(14)

выражаются через одну функцию

$$G_{m,\mathcal{N}}(t,z) = -\frac{2zt^2 f e^{-z} \left(f^{2m} - f^{2(\mathcal{N}-1-m)}\right)}{e^{-z} f(1 - f^{2(\mathcal{N}-1)}) - (1 - f^{2\mathcal{N}})(1+t)}.$$
 (15)

Рассмотрены общие свойства силы BдB/K, действующей на плоскость с номером m.

- 1) Функция G обладает свойством четности $G_{m,\mathcal{N}} = -G_{\mathcal{N}-1-m,\mathcal{N}}$. Поэтому для двух симметрично расположенных плоскостей с номерами m и $\mathcal{N}-1-m$ сила имеет одинаковую величину, но противоположна по направлению. Если \mathcal{N} нечетно, то сила, действующая на центральную плоскость $m = (\mathcal{N}-1)/2$, равна нулю.
- 2) Величина силы, действующей на плоскость с номером m уменьшается, как $\sim m^{-4}$ с увеличением m.
- 3) В случае идеальной проводимости сила, действующая на плоскость m, имеет следующие особенности:
 - а) Для первой (m=0) или последней $(m=\mathcal{N}-1)$ плоскости: $\mathcal{F}_{\mathsf{C}}^{(m,\mathcal{N})}=-\frac{\hbar c \pi^2}{240d^4}=\mathcal{F}_{\mathsf{Cas}}$.
 - b) Для внутренних плоскостей набора $(0 < m < \mathcal{N} 1)$: $\mathcal{F}_{\mathsf{C}}^{(m,\mathcal{N})} = 0$.

Таким образом, в случае идеальной проводимости сила BдB/K будет действовать только на две крайние плоскости в наборе плоскостей.

В **третьей главе** вычисляется энергия $\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}$ притяжения атома или молекулы набором проводящих плоскостей (энергия Казимира–Полдера) методом разрежения среды Лифшица.

С использованием методики, изложенной во второй главе, вычисляется энергия $\mathrm{BgB/K}\ \mathcal{E}_{\mathsf{C}}^{(\mathcal{N})}(\varepsilon)$ для системы, состоящей из набора плоскостей и бесконечной диэлектрической среды, с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega)$ на расстоянии a от крайней плоскости (см. Рис. 2). В разреженной среде $\varepsilon(\omega)=1+4\pi L\alpha(\omega)+O(L^2)$, где L – количество атомов на единицу объема и $\alpha(\omega)$ – поляризуемость атомов или молекул среды. Энергия $\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}$ притяжения атома или молекулы, находящейся на расстоянии a от набора проводящих плоскостей, выражается через энергию $\mathrm{BgB/K}\ \mathcal{E}_{\mathsf{C}}^{(\mathcal{N})}(\varepsilon)$ следующим

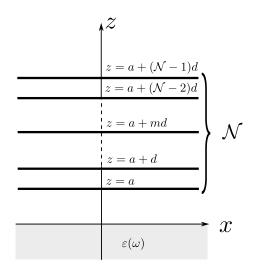


Рис. 2: На рисунке схематично приведена система, состоящая из набора проводящих плоскостей и бесконечной среды с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega)$. Здесь d – расстояние между плоскостями, \mathcal{N} – число плоскостей и a – расстояние между диэлектрической средой и набором плоскостей.

образом:

$$\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})} = -\lim_{L \to 0} \left(\frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial a} \mathcal{E}_{\mathsf{C}}^{(\mathcal{N})}(\varepsilon) \right). \tag{16}$$

Рассмотрены следующие частные случаи:

- 1) Идеальная проводимость, $\sigma \to \infty$. В этом случае энергия $\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}$ не зависит от числа плоскостей \mathcal{N} , так как первая плоскость экранирует взаимодействие атома или молекулы с остальными плоскостями.
- 2) Предел больших расстояний $a \to \infty$. В этом случае

$$\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}\Big|_{a \to \infty} = -\hbar c \frac{3\alpha(0)}{8\pi a^4} q(\mathcal{N}\eta), \tag{17}$$

где

$$q(x) = \frac{1}{6} + \frac{1}{2x^2} - \frac{1}{4x} + \frac{x^2}{2} - \frac{x}{4} - \frac{1}{2x^3} \ln(1+x) - \frac{x(x^2-2)}{2} \ln\left(1+\frac{1}{x}\right). \tag{18}$$

Таким образом, стандартное выражение для энергии Казимира–Полдера умножается на функцию q, которая стремится к единице при $\mathcal{N}\eta \to \infty$.

3) В пределе малых расстояний $a \to 0$ энергия не зависит от проводимости и числа плоскостей:

$$\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}\Big|_{a\to 0} = -\frac{\hbar c}{4\pi a^3} \int_{0}^{\infty} \alpha(z) dz. \tag{19}$$

Это говорит о том, что основной вклад во взаимодействие атома с плоскостью вносит первая, ближайшая к атому плоскость.

- 4) Если расстояние между плоскостями стремится к бесконечности $(d \to \infty)$, то получается выражение для энергии $\mathcal{E}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})}$, совпадающее со случаем $\mathcal{N}=1$. Это очевидно, так как атом будет взаимодействовать только с первой плоскостью, поскольку остальные удалены на большие расстояния.
- 5) Предел $d \to 0$ аналогичен случаю $a \to \infty$. Действительно, в этих случаях атом будет «видеть» весь набор плоскостей как один объект.

В рамках мультиосцилляторной модели атомной поляризуемости проведен численный анализ энергии Казимира—Полдера. Показано, что при увеличении числа плоскостей энергия Казимира—Полдера стремится к определенному пределу в полном согласии с полученными нами аналитическими выражениями для случая бесконечного количества плоскостей. Чем дальше находится атом/молекула от набора плоскостей, тем медленнее энергия Казимира—Полдера выходит на плато. При малых расстояниях между атомом/молекулой и набором плоскостей основной вклад в энергию Казимира—Полдера определяется ближайшими плоскостями.

В четвертой главе рассмотрена сила ВдВ/К и Казимира–Полдера при ненулевой температуре. Для учета влияния температуры для интегрирования по непрерывным частотам в выражениях, полученных при нулевой температуре, использовано следующее правило замены интегрирования суммированием по частотам Мацубары $\xi_n = 2\pi n k_B T/\hbar$:

$$\int_0^\infty g(\omega)d\omega = \frac{2\pi k_B T}{\hbar} \sum_{n=0}^\infty g(\xi_n). \tag{20}$$

Штрих у знака суммы означает, что слагаемое с n=0 имеет множитель 1/2.

Используя выражения для энергии BдB/K и Казимира–Полдера при нулевой температуре (главы 2, 3), получены следующие выражения для свободной энергии BдB/K (C) и Казимира–Полдера (CP):

$$\mathcal{F}_{\mathsf{C}}^{(\mathcal{N})} = \frac{k_B T}{4\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} ' \iint d^2 k_{\perp} \ln \left\{ \Gamma_{\mathcal{N}} \left(\frac{\eta_n^{\mathsf{TM}} \kappa_n}{\xi_n} \right) \Gamma_{\mathcal{N}} \left(\frac{\eta_n^{\mathsf{TE}} \xi_n}{\kappa_n} \right) \right\},$$

$$\mathcal{F}_{\mathsf{CP}}^{(\mathcal{N})} = \frac{k_B T}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} ' \iint d^2 k_{\perp} \alpha_n \left\{ \Phi_{\mathcal{N}} \left(\frac{\eta_n^{\mathsf{TM}} \kappa_n}{\xi_n} \right) \left(\frac{\xi_n^2}{\kappa_n^2} - 2 \right) - \Phi_{\mathcal{N}} \left(\frac{\eta_n^{\mathsf{TE}} \xi_n}{\kappa_n} \right) \left(\frac{\xi_n^2}{\kappa_n^2} \right) \right\}, (21)$$

где

$$\Gamma_{\mathcal{N}}(t) = \frac{e^{-d\kappa_n(\mathcal{N}-1)}}{(1+t)^{\mathcal{N}}} \frac{1}{f(t)^{\mathcal{N}-1}} \frac{1-f(t)^{2\mathcal{N}}}{1-f(t)^2} \left(1+t-e^{-d\kappa_n}f(t)\frac{1-f(t)^{2(\mathcal{N}-1)}}{1-f(t)^{2\mathcal{N}}}\right),$$

$$\Phi_{\mathcal{N}}(t) = \frac{t\kappa_n e^{-2a\kappa_n}}{1+t-e^{-d\kappa_n}f(t)\frac{1-f(t)^{2(\mathcal{N}-1)}}{1-f(t)^{2\mathcal{N}}}}.$$
(22)

Здесь $f(t)=\sqrt{(\cosh d\kappa_n+t\sinh d\kappa_n)^2-1}+\cosh d\kappa_n+t\sinh d\kappa_n,\ \kappa_n=\sqrt{k_\perp^2+\xi_n^2/c^2}$ и $\alpha_n=$

ВдВ/К совпадают и уменьшаются как d^{-3} . Для малых межплоскостных расстояний d<5 нм для системы $\mathcal N$ плоскостей энергия ВдВ/К $\sim d^{-\frac{5}{2}}$, что характерно для вза-имодействия металлических пленок [14].

Проведено сравнение зависимости энергии Казимира—Полдера от числа плоскостей в рамках модели постоянной проводимости и модели проводимости Друде—Лоренца. Энергия для модели проводимости Друде—Лоренца при увеличении числа плоскостей гораздо быстрее достигает плато, чем энергия для модели с постоянной проводимостью.

Вычислена энергия ВдВ/К, приходящаяся на один графен в наборе из \mathcal{N} графенов, на основе которой получена энергия связи E_{ib} плоскостей в графите. В модели Друде-Лоренца $E_{ib} = 58 \frac{\text{мэВ}}{\text{атом}}$, тогда как для модели с универсальной проводимостью графена $E_{ib} = 11 \frac{\text{мэВ}}{\text{атом}}$. Экспериментальные значения энергии связи [15] $E_{ib} = 61 \pm 5 \frac{\text{мэВ}}{\text{атом}}$ хорошо согласуются с вычислениями в рамках модели Друде-Лоренца.

Проведенный численный анализ показывает, что, как и в случае энергии ВдВ/К для набора плоскостей, разница между моделью проводимости Друде—Лоренца и моделью постоянной проводимости носит лишь количественный характер даже в случае малых расстояний между атомом (молекулой) и набором плоскостей.

В заключении приведены основные результаты работы.

Основные результаты и выводы

- 1. Разработан метод для вычисления энергии Ван дер Ваальса/Казимира для набора параллельных проводящих плоскостей.
- 2. В работе впервые получено аналитическое выражение энергии Ван дер Ваальса/Казимира для набора $\mathcal N$ проводящих плоскостей при нулевой температуре.
- 3. Установлено, что с увеличением числа плоскостей энергия растет, а для случая идеальной проводимости энергия Ван дер Ваальса/Казимира представляется в виде суммы энергии пар плоскостей.
- 4. Получены аналитические выражения для силы, действующей на каждую плоскость, в наборе равноотстоящих проводящих плоскостей.
- 5. В случае модели проводимости Друде-Лоренца, при малых расстояниях, энергия обратно пропорциональна расстоянию между плоскостями в степени 5/2.
- 6. Показано, что энергия связи между слоями графита по порядку величины совпадает с энергией Ван дер Ваальса/Казимира, полученной для системы с проводимостью Друде—Лоренца.

Список публикаций автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах:

- А1. Хуснутдинов, H. P. Эффект Казимира для совокупности параллельных проводящих поверхностей / Н.Р. Хуснутдинов, **Р.Н. Кашапов** // $TM\Phi$. 2015. Т. 183. С. 491–500.
- A2. Khusnutdinov, N. Casimir effect for a stack of conductive planes / N. Khusnutdinov, R. Kashapov, L. M. Woods // Phys. Rev. D. 2015. V. 92. P. 045002.
- A3. Kashapov, R. The Casimir effect for planar layered system / R. Kashapov, N. Khusnutdinov, L. M. Woods // Int. J. Mod. Phys. A. -2016. V. 31. P. 1641028.
- A4. Khusnutdinov, N. Casimir-Polder effect for a stack of conductive planes / N. Khusnutdinov, R. Kashapov, L. M. Woods // Phys. Rev. A. 2016. V. 94.– P. 012513.
- A5. Khusnutdinov, N. The Casimir energy for two and three layers of graphens / N. Khusnutdinov, R. Kashapov, L. M. Woods // Вестник ТГПУ. 2014. Т. 12. С. 132–135.
- A6. Khusnutdinov, N. Thermal Casimir and Casimir-Polder interactions in N parallel 2D Dirac materials / N. Khusnutdinov, R. Kashapov, L. M. Woods.// 2D Materials 2018. V. 5.– P. 035032.

Тезисы и материалы научных конференций:

- А7. Хуснутдинов, Н. Р. Эффект Казимира для проводящих двумерных повехностей / Н. Р. Хуснутдинов, Р. Н. Кашапов // Сборник тезисов: 15-я Российская гравитационная конференция. Международная конференция по гравитации, космологии и астрофизике / КФУ. Казань: Фолиант, 2014. С. 85.
- A8. Khusnutdinov, N. The Casimir effect for a stack of conductive planes / N. Khusnutdinov, R. Kashapov, L.M. Woods // Сборник тезисов: XII Международная конференция по гравитации, астрофизике и космологии, посвященная столетию общей теории относительности Эйнштейна (ICGAC-12)/ РУДН. Москва: Изд-во РУДН, 2015. С. 103–104.
- A9. Kashapov, R. The zeta-function approach applied to Casimir effect in a stack of conductive planes. / R. Kashapov, N. Khusnutdinov, L. M. Woods // Physical and Mathematical Aspects of Symmetries / CBPF. Rio de Janeiro : Springer, 2017. P. 203–208.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- [1] Лондон, Φ . Общая теория молекулярных сил / Φ . Лондон // УФН. 1937. Т. 17, N9 4. С. 421–446.
- [2] Casimir, H. B. G. The Influence of retardation on the London-van der Waals forces /
 H. B. G. Casimir, D. Polder // Phys. Rev. 1948. Vol. 73. Pp. 360–372.

- [3] Bordag, M. Advances in the Casimir Effect / M. Bordag, G. Klimchitskaya, U. Mohideen, V. Mostepanenko. Oxford University Press, Oxford, 2009. 749 pp.
- [4] Milonni, P. W. The Quantum Vacuum. An Introduction to Quantum Electrodynamics. /
 P. W. Milonni. Academic Press, New York, 1994. 522 pp.
- [5] Casimir, H. B. G. On the Attraction Between Two Perfectly Conducting Plates / H. B. G. Casimir // Proc. K. Ned. Akad. Wet. 1948. Vol. 51. Pp. 793–795.
- [6] Parsegian, A. V. Van der Waals Forces. A Handbook for Biologists, Chemists, Engineers, and Physicists / A. V. Parsegian. Cambridge University Press, 2006. 380 pp.
- [7] Fialkovsky, I. Quest for Casimir repulsion between Chern-Simons surfaces / I. Fialkovsky, N. Khusnutdinov, D. Vassilevich // Phys. Rev. B.—2018.—Vol. 97, no. 16.—P. 165432.
- [8] Woods, L. M. Materials perspective on Casimir and van der Waals interactions / L. M. Woods, D. A. R. Dalvit, A. Tkatchenko, P. Rodriguez-Lopez, A. W. Rodriguez, R. Podgornik // Rev. Mod. Phys. 2016. Vol. 88, no. 4. P. 45003.
- [9] Klimchitskaya, G. L. Recent measurements of the Casimir force: Comparison between experiment and theory / G. L. Klimchitskaya, V. M. Mostepanenko // Mod. Phys. Lett. A.-2020.- Vol. 35, no. 03. P. 2040007.
- [10] Novoselov, K. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, et al // Science. 2004. Vol. 306, no. 5696. Pp. 666–669.
- [11] Bordag, M. Casimir interaction between a perfect conductor and graphene described by the Dirac model / M. Bordag, I. V. Fialkovsky, D. M. Gitman, D. V. Vassilevich // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 80. P. 245406.
- [12] Fialkovsky, I. V. Finite-temperature Casimir effect for graphene / I. V. Fialkovsky, V. N. Marachevsky, D. V. Vassilevich // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 035446.
- [13] $Djuriši\acute{c}$, A. Optical properties of graphite / A. Djuriši\acute{c}, E. Li // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. Pp. 7404–7410.
- [14] Бараш, Ю. C. Влияние тонких поверхностных слоев на ван-дер-ваальсово взаимо-действие макроскопических тел и свойства жидких пленок / Ю. С. Бараш // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 294—296.
- [15] Zacharia, R. Interlayer cohesive energy of graphite from thermal desorption of polyaromatic hydrocarbons / R. Zacharia, H. Ulbricht, T. Hertel // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 155406.