Уравнение Шредингера-Ланжевена-Костина с диссипативным слагаемым в интегральной форме

Смирновский Александр Андреевич
аспирант
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: smirta@mail.ru

Введение

В настоящее время происходит интенсивное развитие нанотехнологий, приборов и одноэлектронных систем. Поэтому исследование квантовых динамических закономерностей имеет большое значение для развития фундаментальной науки и приложений. В реальных случаях необходимо учитывать влияние внешней среды на рассматриваемый квантовый объект. В настоящее время имеется несколько способов учета влияния диссипации. Здесь рассмотрен феноменологический подход, приводящий к уравнению Шредингера-Ланжевена-Костина [Kostin, 1972]. Это уравнение использовалось для решения прикладных и фундаментальных задач многими исследователями [Weiner, 1974; Van, 2004]. Автором предложено обобщение формы диссипативного слагаемого в этом уравнении, которое открывает более широкие возможности для моделирования диссипативных процессов.

Переформулировка уравнения Шредингера-Ланжевена Костина

Исходное одномерное уравнение Шредингера-Ланжевена-Костина может быть записано в виде [Kostin, 1972]:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi-\frac{i\tilde{k}\hbar}{2}\psi\left(ln\frac{\psi}{\psi^*}-\left\langle ln\frac{\psi}{\psi^*}\right\rangle\right)+xF(t),\qquad(1)$$

где $F(t)$ - случайная сила (в дальнейшем будет опущена). Слагаемое с логарифмом отвечает за диссипацию (угловые скобки означают квантово-механическое среднее значение). Если перейти к уравнениям Эренфеста, то получим диссипативную силу $-k\langle V\rangle$. Записав уравнение в форме Маделунга, получим диссипативное слагаемое в виде $-kV$ (V - полевая скорость); такое уравнение было применено для решения задачи о движении электрона в поле непрерывного заряда [Санин, 1994].

В рамках уравнения (1) было проведено численное моделирование динамики квантовой системы для квадратичного потенциала и потенциала с двойной ямой, ограниченного непроницаемыми стенками [Smirnovsky, 2006]. Были вычислены средние значения динамических переменных, а также их Фурье-спектры, построены карты уровней плотности вероятности. Проведенные расчеты показали, что для квадратичного потенциала выполняется принцип соответствия. В случае, когда внешняя сила отсутствует, решения стремились к основному состоянию, как для квадратичного потенциала, так и для потенциала с двойной ямой. Такое поведение решений уравнения (1) было также отмечено другими авторами [Van, 2004]. В статье [Ushveridze, 1994], используя уравнение Дёбнера-Голдина, было установлено, что для квадратичного потенциала происходит переход в основное состояния. Вопрос об устойчивости высших состояний для уравнения Дёбнера-Голдина остался открытым. Однако, как было показано автором настоящей работы, для уравнения (1) все высшие стационарные состояния оказываются неустойчивыми. В этой связи целесообразно получить такую диссипативную силу, для которой высшие стационарные состояния оказываются устойчивыми. Автором было предложено ввести в (1) зависимость коэффициента трения от координаты. Однако для этого необходимо переформулировать уравнение (1).

Известно, что квантовое действие S и полевая скорость V определяются как: $S=-i\hbar/2\ln\left(\psi/\psi^*\right)$, $V=1/m\,\partial S/\partial x$. Тогда диссипативное слагаемое в уравнении (1) можно переписать в интегральной форме:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi+\hbar\psi\left(\int_{x_0}^{x}kVdx-\left\langle\int_{x_0}^{x}kVdx\right\rangle\right), \qquad (2)$$

где $k=\tilde{k}/m$. (Можно показать, что выбор нижнего предела интегрирования не играет роли.)

В рассматриваемой здесь задаче вместо подынтегрального выражения для силы в (2) формально введена функция $f(x,V)$, зависящая не только от скорости, но и от координаты:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi+\hbar\psi\left(\int_{x_0}^{x}f(x,V)dx-\left\langle\int_{x_0}^{x}f(x,V)dx\right\rangle\right),$$

из которого, положив $f(x)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\dot{N}}{\partial N}\right)$ ($N=\psi^*\psi$), сразу получим уравнение Дёбнера-Голдина, но с дополнительным усредненным слагаемым (можно показать, что оно не играет роли в динамике системы).

Уравнение (2) позволяет рассмотреть случай, когда коэффициент трения зависит от координаты: $k=k(x)$. Из проведенного автором исследования для квадратичного потенциала в случае $k(x)\propto\left(x^2-L^2\right)$ следует, что вблизи некоторого высшего стационарного состояния (определяемого значением L) наблюдаются небольшие осцилляции средней координаты на частоте, близкой к одной из высших гармоник собственной частоты осциллятора. Если устремить L к нулю, то происходит переход в основное стационарное состояние.

Литература

1. M.D. Kostin (1972) On the Schrödinger-Langevin equation // The Journ. of Chem. Phys., vol. 57, No 9, p. 3589-3591
2. J.H. Weiner, R.E. Forman (1974) Rate theory for solids. V. Quantum Brownian-motion model // Phys. Rev. B. vol. 10, N2, p. 325-337
3. P. Ván, T. Fülöp (2004) Stability of stationary solutions of the Schrödinger-Langevin equation // Physics Letters A, 323, p. 374-381

4. A.A. Smirnovsky (2006) Temporal resonances and structures in quantum systems under dissipation. Proc. SPAS jointly UWM. Tenth Intern. Workshop on New Appr. to High-Tech.: NDTSC-2006, 5-8 July 2006, Olsztyn, Poland
5. А.Л. Санин (1994) Квантовый транспорт электрона в пространстве с однородным положительным зарядом и световой волной // Оптика и спектроскопия, т. 77, №5, стр. 822-826

6. A.G. Ushveridze (1994) Dissipative quantum mechanics. A special Doebner-Goldin equation, its properties and exact solutions // Phys. Lett. A, vol. 185, p. 123-127
7. A.G. Ushveridze (1994) The special Doebner-Goldin equation as a fundamental equation of dissipative quantum mechanics // Phys. Lett. A, vol. 185, p. 128-132