

На правах рукописи

СМИРНОВСКИЙ Александр Андреевич

**Динамика квантовых волновых пакетов
в системах с полиномиальными потенциалами
и трением**

01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2008

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель доктор физико-математических наук,
профессор Санин Андрей Леонардович

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук, профессор
Мелькер Александр Иосифович (СПбГПУ)

кандидат физико-математических наук
Мухоморов Владимир Константинович
(Агрофизический институт)

Ведущая организация Петербургский институт ядерной физики им.
Б.П. Константинова Российской академии наук

Защита состоится 12 ноября 2008 г. в 16.00 на заседании диссертационного совета Д212.229.05 ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, г. С.-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, 2 учебный корпус, ауд. 265

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Автореферат разослан « » октября 2008 г. Отзывы направлять по адресу: 195251, г. С.-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, 2 учебный корпус, деканат ФМФ, ученому секретарю Воробьевой Т.В.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д212.229.05

кандидат физико-математических наук, доцент

Т.В. Воробьева

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Введение и актуальность задачи. Исследование квантовых динамических закономерностей имеет фундаментальное значение для развития физики конденсированного состояния, химии, наноэлектроники и точных технологий. оовременные достижения лазерной импульсной фемто- и аттосекундной техники позволяют проводить экспериментальные исследования динамики микрочастицы на разных пространственных масштабах. Поэтому возрос интерес к теоретическим исследованиям процессов когерентных колебаний и делокализации квантовых волновых пакетов, резонансов во внешних полях как в изолированных квантовых системах, так и с учетом взаимодействия с окружающей средой. Объектом исследований становятся различные квантовые системы, в том числе традиционные, такие как потенциальная яма с непроницаемыми стенками, осциллятор и ротатор. Необходимость в проведении этих исследований также обусловлена прикладными задачами, такими как: передача информации квантовыми системами, разработка квантовых компьютеров и других приборов. В последние годы интенсивно разрабатываются методы управления квантовыми волновыми пакетами под воздействием электромагнитного поля. Один из них представлен теорией оптимального управления. Эта теория рассматривает динамический процесс перехода из исходного приготовленного состояния в конечное заданное состояние при помощи специально создаваемых лазерных импульсов с определенной формой и соответствующим Фурье-спектром. Теория реализуется в рамках численных итерационных алгоритмов, описывающих обратную связь между импульсами и квантовыми состояниями и являющихся самосогласованными. Для решения задач управления необходимо изучать условия, при которых движение может быть когерентным и, наоборот, чувствительным к разрушению когерентности. Возникновение декогерентности является фундаментальной проблемой, ей уделяется много внимания в научной литературе.

Для описания квантовых изолированных систем используются различные формы уравнений движения: нестационарное уравнение Шредингера, квантовое уравнение Гамильтона-Якоби, уравнения Маделунга. Влияние окружающей среды на динамику микрочастицы может быть учтено различными способами описания. Если не требуется полного описания системы вместе с окружающей средой и можно перейти к упрощенному, более краткому описанию, то достаточно ввести в уравнения квантовой динамики для системы один или несколько параметров, характеризующих влияние окружающей среды. Так появилось уравнение Гейзенберга-Ланжевена для оператора импульса [1], которое послужило основой для формулировки уравнения Шредингера-Ланжевена-Костина (ШЛК) [2, 3]. Уравнение ШЛК содержит слагаемое, включающее коэффициент трения. Так как оно предназначалось для описания квантового броуновского движения, то содержит еще одно слагаемое – потенциал случайной силы. Оба слагаемых входят в уравнение ШЛК аддитивно и не зависят друг от друга. При

определенных допущениях, а также в модельных задачах, действие случайной силы можно игнорировать, как это сделано в статьях [4-7]. Уравнение ШЛК без случайной силы имеет в качестве классического аналога уравнение движения с диссипативной силой, пропорциональной скорости и противоположно ей направленной.

Диссертационная работа посвящена численному интегрированию уравнения ШЛК и исследованию динамических закономерностей в пространственно-ограниченных квантовых системах с полиномиальными потенциалами, трением и обратной связью. Основные темы исследования: собственные колебания в одномерных системах, вынужденные колебания при импульсном воздействии на квантовые волновые пакеты, моделирование обратной связи, туннелирование в системах с полиномиальными потенциалами, влияние окружающей среды в рамках уравнения ШЛК. Рассматриваемая тематика и полученные результаты являются актуальными и значимыми для приложений в современной радиоэлектронике.

Цели и задачи исследования. Цель исследований — развитие динамической теории когерентных процессов, делокализации и сложных колебаний при внешних воздействиях и влиянии окружающей среды. Это определяет постановку следующих задач

1. Исследование квантового пространственно-ограниченного осциллятора в рамках нестационарного уравнения Шредингера; расчеты динамических средних и их Фурье-спектров, а также контурных карт (уровней) плотности вероятности.

2. Анализ квантового пространственно ограниченного осциллятора с трением в рамках уравнения Шредингера-Ланжевена-Костина; расчеты динамических средних и их Фурье-спектров, а также фазовых траекторий.

3. Динамические расчеты при разных начальных условиях: в форме гауссова пакета с заданной скоростью, при помощи воздействия одиночного импульса внешней силы.

4. Исследование вынужденных колебаний для пространственно-ограниченного осциллятора с трением, переход к установившемуся режиму колебаний; когерентные колебания; влияние случайной силы на колебания.

5. Разработка квантового аналога классической системы с обратной связью, с отрицательным трением, переход к хаотическому режиму колебаний.

6. Численное моделирование пространственно-ограниченных квантовых систем с трением и полиномиальными потенциалами, пропорциональными третьей и четвертой степеням по координате.

7. Расчеты инъекции двумерного квантового пакета волн через плоскую щель, дифракция на щели, управление пакетом.

В этих исследованиях необходимо установить области параметров, при которых в процессе эволюции волновые пакеты остаются локализованными и произведение неопределенностей остается минимизированным и, наоборот, когда происходит делокализация квантовых волновых пакетов, а движение становится сложным,

нерегулярным; выявить режимы когерентного движения в условиях диссипации и воздействия внешних сил.

Научная новизна диссертации

1. С единых позиций в рамках уравнения Шредингера — Ланжевена — Костина проведены всесторонние и обширные количественные исследования динамики квантовых волновых пакетов в системах с полиномиальными потенциалами, подверженных действию внешних силовых полей и окружающей среды.

2. Разработан численный метод решения уравнения ШЛК, использующий процедуру установления по псевдвремени. Подобный метод применяется для решения уравнений классической гидродинамики и других.

3. Пространственно-ограниченный осциллятор с квадратичным потенциалом (осциллятор в ящике) исследован с учетом трения и силы, обусловленной ланжевенским случайным потенциалом. Если амплитуда колебаний соизмерима с половинным размером системы, то частотный спектр усложняется: вместо одной спектральной линии имеет место структурированный их набор, но спектр остается дискретным. Детально изучены вынужденные колебания пространственно-ограниченного осциллятора с трением и внешней силой в виде периодической последовательности импульсов. Установлены режимы вынужденных когерентных колебаний с минимизированным произведением неопределенностей координаты и скорости, а также режимы колебаний, когда происходит рост квантовых флуктуаций и произведения неопределенностей координаты и скорости.

4. Предложена модель квантового осциллятора с трением и обратной связью, являющаяся аналогом классического осциллятора с трением и обратной связью (классические механические часы). Варьируя параметры предложенной модели — коэффициент трения, силу обратной связи — найден режим движения с минимизированным произведением неопределенностей координаты и скорости, с дискретным частотным спектром колебаний. При определенном значении силы с уменьшением коэффициента трения существует бифуркационное (критическое) значение коэффициента, при котором возникают сложные колебания в системе, характеризующиеся всюду плотным частотным спектром для зависимости средней координаты от времени.

5. В квантовой системе с двойной потенциальной ямой при воздействии силы трения и внешней гармонической силы исследованы различные режимы туннелирования и колебаний. Частоты внешнего воздействия были близки или равны частотам переходов между соседними энергетическими уровнями, при этом высота барьера между ямами варьировалась в определенных пределах. Частота переходов между первым возбужденным и основным уровнем, обусловленная туннелированием, характеризует релокализацию волнового пакета. Частота перехода между возбужденными третьим и вторым энергетическими уровнями характеризует мелкомасштабные колебания пакета в каждой из ям. Частотные Фурье-спектры для

колебаний средней координаты и карты уровней плотности вероятности дают картину динамики квантовых волновых пакетов. Возможны режимы, когда Фурье-компонента на частоте релокализации является доминирующей.

6. В квантовой системе, образуемой разностью потенциалов второй и третьей степени по координате, исследовано динамическое туннелирование из ямы, в которой происходят колебания волнового пакета, через барьер в свободное пространство. Установлено дискретное порционное туннелирование, при малой высоте барьера оно становится двухступенчатым.

7. Исследована дифракция квантового волнового пакета на плоской щели в рамках двумерного уравнения Шредингера — Ланжевена — Костина. Для начального гауссова пакета с продольной скоростью изучены карты уровней плотности вероятности на двумерной координатной плоскости в фиксированные моменты времени, динамика во времени средних продольной и поперечной скоростей, а также распределение плотности вероятности в зависимости от поперечной координаты для фиксированных моментов времени и определенного значения продольной координаты. Влияние трения на эти распределения также изучено.

Защищаемые положения:

1) предложен метод численного решения квантового уравнения Шредингера-Ланжевена-Костина, основанный на введении дополнительной производной по псевдовремени в разностную схему Кранка-Никольсона; разработан программный код для подробного изучения решений уравнения ШЛК;

2) найден режим вынужденных когерентных колебаний с минимизированным произведением неопределенностей и изучено влияние стенок на рост произведения и структуру Фурье-спектров координаты и скорости;

3) представлена и исследована модель квантового аналога классического осциллятора с трением и обратной связью, в том числе с отрицательным трением; установлен переход от когерентных колебаний к сложным, характеризующимися всюду плотным спектром;

4) установлены закономерности туннелирования в системах с полиномиальными потенциалами: а) для двойной ямы с трением и внешней силой мелкомасштабные осцилляции затухают, а осцилляции, обусловленные туннелированием, сохраняются, б) для комбинации потенциалов кубического и квадратичного обнаружены режимы порционного туннелирования через определенные промежутки времени.

Практическая значимость работы. Теоретические исследования и компьютерное моделирование волновой динамики микрочастицы, визуализация расчетов формируют научные представления и базу знаний, необходимых в физике конденсированного состояния, электронике, разработках квантовых приборов и компьютеров, и в других целях. Разработанный программный продукт может быть использован для последующих исследований движения микрочастицы в квантовых системах с полиномиальными потенциалами и диссипацией, а также в учебном процессе.

Достоверность результатов. Достоверность полученных результатов, положений и выводов подтверждается внутренней согласованностью всей совокупности данных качественного анализа и численных расчетов, корректным применением апробированных методов вычислительной физики, квантовой механики и теории конденсированного состояния.

Апробация. Основные результаты и положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: Политехнический симпозиум (Санкт-Петербург, 2005, 2006, 2007); Демидовские чтения на Урале (Екатеринбург, 2006); Tenth. Intern. Workshop on NDTSC-2006 (Olsztyn, Poland, 2006); XIV, XV международные конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (Москва, 2007, 2008); XIII, XIV международные научно-методические конференции «Высокие интеллектуальные технологии в образовании и науке» (Санкт-Петербург, 2006, 2007); X, XI, XII Всероссийские конференции по проблемам науки и высшей школы «Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах» (Санкт-Петербург, 2005, 2006, 2007); семинар сектора численного моделирования ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН; семинары кафедры теоретической физики СПбПУ; семинар сектора теории конденсированного состояния отделения теоретической физики в ПИЯФ им. Б.П. Константинова РАН.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, библиографического списка (119 наименований); содержит 147 страниц текста, иллюстрируется 55 рисунками.

Личный вклад автора. Соискатель принимал участие в постановке ряда задач, разработке метода решения уравнения ШЛК, анализе результатов, им проведены все численные расчеты и создан программный продукт.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава является обзорной, она состоит из пяти параграфов, в которых проводится критический анализ состояния динамических проблем одномерных квантовых систем, включая потенциальную яму с бесконечными стенками, стационарную задачу об осцилляторе в яме, двойную яму, динамическое туннелирование. Коллапсы и релокализации исходной формы квантовых волновых пакетов, дробные возвраты, классические и квантовые временные масштабы, квантовый хаос — характерные свойства динамики в этих системах. Также обсуждаются автокорреляционная функция Хауенберга, энтропии в координатном и импульсном пространствах, средние значения координаты и скорости, частотный Фурье-спектр как методы анализа динамических закономерностей. В рамках теории оптимального управления кратко излагается проблема управления квантовыми волновыми пакетами, их переводов из исходных в заданные конечные состояния при помощи воздействия лазерными импульсами.

Поскольку в диссертационной работе исследуется влияние окружающей среды на движение микрочастицы, рассматривается состояние проблемы квантовых уравнений движения шредингеровского типа с дополнительным диссипативным слагаемым. Примером такого уравнения является уравнение Шредингера-Ланжевена, выведенное Костиным (уравнение Шредингера-Ланжевена-Костина, ШЛК). Это уравнение, как и другие аналогичного вида с нелинейным диссипативным слагаемым, многократно обсуждались в научной литературе. В безразмерной форме уравнение ШЛК может быть представлено в виде, инвариантном относительно выбора единиц измерения:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \zeta^2} + U_{\Sigma} \psi - \frac{ik}{2} \left(\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \left\langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \right\rangle \right) \psi. \quad (1)$$

Здесь ψ и ψ^* - безразмерные волновая и комплексно сопряженная ей функции, ζ и τ - координата и время. Величина U_{Σ} состоит из двух слагаемых

$$U_{\Sigma} = U(\zeta) + U_{ext}(\zeta, \tau) \quad (2)$$

Первое слагаемое в (2) определяет статический потенциал на отрезке $-\zeta_L \leq \zeta \leq \zeta_L$. Второе слагаемое в (2) представляет собой внешнюю силу, зависящую от времени (например, импульсная сила или гармоническая). Слагаемое в (1), включающее множитель k , характеризует диссипативные свойства. Символ $\langle \rangle$ означает среднее значение на отрезке $-\zeta_L \leq \zeta \leq \zeta_L$. Уравнение (1) описывает омическое трение в среде.

Во второй главе обсуждаются режимы движения осциллятора в яме для двух случаев: изолированной квантовой системы и, наоборот, с учетом ее взаимодействия с окружающей средой (тепловой баней) в рамках уравнения ШЛК. В первом случае рассчитывается энергетический спектр стационарной задачи и устанавливаются области движения с режимами гармонического осциллятора, свободного движения частицы в яме и промежуточного между ними. Для разности энергий $\Delta \varepsilon_n$ между соседними уровнями установлено наличие резкого излома в функциональной зависимости $\Delta \varepsilon_n(n)$ (рис. 1). Нестационарная задача формулируется в рамках уравнения Шредингера, зависящего от координаты и времени, с начальным условием в форме гауссова пакета с заданной скоростью. Пакет такого типа может быть сформирован из основного состояния под воздействием кратковременного импульса внешнего потенциала. Если скорость начального гауссова пакета мала, то реализуется режим гармонических колебаний: центр тяжести пакета не достигает стенок ямы, а Фурье-спектр для зависимости средней координаты от времени содержит практически одну спектральную компоненту на частоте гармонического осциллятора. Если скорость начального пакета достаточно велика и амплитуда средней координаты становится сравнимой с половинным размером ямы, то характер колебаний средней координаты и её Фурье-спектр существенно изменяются. Временная реализация для средней координаты имеет области интенсивных и слабых колебаний с амплитудной

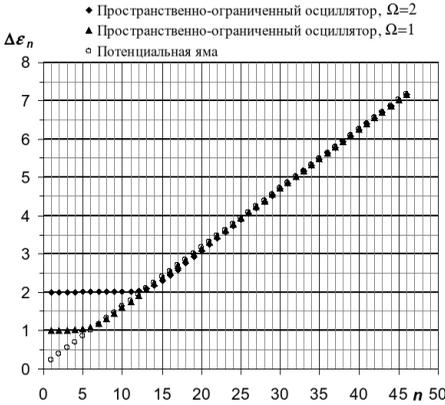


Рис.1 $\Delta \varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$, n — индекс состояния

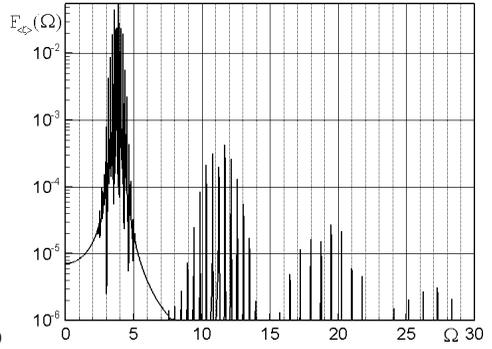


Рис. 2 Фурье-спектр средней координаты

модуляцией, а также промежутки между ними, где колебания практически отсутствуют. Фурье-спектр характеризуется максимумами на классической частоте и её нечетных гармониках, при этом вместо отдельных спектральных линий имеются их дискретные наборы (рис. 2). Для анализа структуры волновых пакетов исследовались также автокорреляционная функция Науенберга и ее Фурье-спектр, полученные результаты согласуются с другими подходами. Учет воздействия окружающей среды на основе силы трения, предложенной Костиным, позволяет установить закономерности для средней координаты, аналогичные классическим колебаниям осциллятора с трением, т. е. подтвердить выполнение принципа соответствия.

Осциллятор с отрицательным трением может рассматриваться как идеализированная модель системы с обратной связью. Примером реальной системы может быть классический осциллятор ван дер Поля. Квантовый осциллятор с отрицательным трением, ограниченный стенками ямы, исследован для начального гауссова пакета, расположенного в центре системы и имеющего нулевую скорость. С течением времени средние значения координаты и скорости остаются равными нулю как и в начальный момент времени, однако стандартные отклонения координаты и скорости осциллируют и возрастают по амплитуде. Если в начальном состоянии средние значения координаты или скорости отличны от нуля, то также происходит рост амплитуды колебаний для средних при сохранении гауссовой формы пакета. В целом, картина колебаний для средних в этом случае аналогична классическому осциллятору с отрицательным трением. Квантовая система с двойной потенциальной ямой является объектом непрерывающихся исследований, которые касаются различных сторон динамики волновых пакетов в тех случаях, когда система изолирована или взаимодействует с окружением. Несмотря на это, представленные исследования дополняют результаты, имеющиеся в литературе. Для изолированной двухъямной системы с потенциалом $U(\zeta) = a(\zeta^2 - b^2)^2$ и начального гауссова пакета,

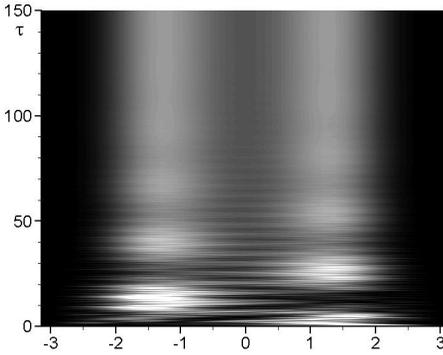


Рис. 3. Двухямный потенциал с трением

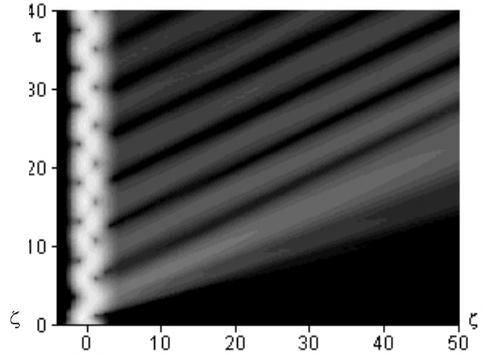


Рис. 4. Порционное туннелирование

локализованного в одной из ям, исследованы колебания пакета и установлены характерные временные масштабы — периоды колебаний. Один из них — крупномасштабный — определяется движением из одной ямы в другую и обратно, обусловлен туннелированием; другой — мелкомасштабными колебаниями в каждой из ям. Соответствующие этим периодам частоты определяются как разность энергетических уровней стационарных состояний. Для низкой частоты (крупномасштабные осцилляции) $\Omega_1 = \Delta \varepsilon_{21}$, для высокой (мелкомасштабные осцилляции) $\Omega_2 = \Delta \varepsilon_{32}$, где $\Delta \varepsilon_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j$, ε_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) - уровни энергий. Фурье-спектр временной зависимости средней координаты как раз содержит частоты Ω_1 и Ω_2 . Если система не является изолированной и подвержена действию силы трения, то из возбужденного начального состояния с течением времени она постепенно переходит в основное стационарное состояние (рис. 3). Начальный гауссов пакет, локализованный в одной из ям, перераспределяется на обе ямы. Конечное распределение представляет собой симметричную функцию относительно центра системы. Карта уровней плотности вероятности на плоскости (ζ, τ) , временные реализации для средних координаты и скорости, их Фурье-спектры, распределения плотности вероятности по координате в разные моменты времени, вычисленные при разных начальных условиях и высотах барьера между ямами дают наглядную картину волново-пакетной динамики. Используя эти же методы, исследовано туннелирование в другой потенциальной системе, представленной композицией двух потенциалов: квадратичного и кубического — $U = \mu(1/2 \zeta^2 - 1/3 \beta \zeta^3)$, отрицательная ветвь потенциала удалена. Такая система представляет собой яму и барьер. Гауссов волновой пакет задан в центре ямы с начальной скоростью.

Существенной чертой колебаний плотности вероятности является сопутствующее им истечение вероятностной жидкости из области, где происходят колебания. Это истечение наблюдается через дискретные промежутки времени, когда пакет

локализуется у правой границы ямы (рис. 4). Если высота барьера достаточно мала, то реализуется двухступенчатое туннелирование.

Уравнение ШЛК и способ его решения, предложенный в диссертации, применялись не только для одномерных задач. В диссертации рассмотрена задача дифракции квантового волнового пакета на плоской щели. Начальный двумерный гауссов пакет с продольной компонентой скорости инжектируется через плоскую щель. В процессе эволюции пакет дифрагирует на щели, распадается на фрагменты, возникает поперечное движение. Карта распределения плотности вероятности на плоскости в фиксированные моменты времени, а также ее зависимость относительно поперечной координаты для заданного значения продольной координаты в разные моменты времени исследованы в деталях. Влияние трения на эти зависимости, а также на затухание компонент скоростей показывают приемлемость использования уравнения ШЛК.

В третьей главе представлены материалы исследования вынужденных колебаний квантовых систем с полиномиальными потенциалами, трением и разных формах внешнего воздействия, зависящего от времени. Для квадратичного потенциала, ограниченного стенками потенциальной ямы, и внешней силы, обусловленной потенциалом $U_{ext}(\tau) = \begin{cases} -F_0 \zeta, & \tau \in (nT, nT + \Delta\tau) \\ 0, & \tau \notin (nT, nT + \Delta\tau) \end{cases}$, где T — период повторения импульсов, $\Delta\tau$ — время действия импульса ($\Delta\tau \ll T$), n — целое. Если собственная частота осциллятора $\Omega = 1$, период повторения импульсов $T = 2\pi$, $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0.1$, F_0 мала, а начальный гауссов пакет имеет нулевую скорость, то можно реализовать простой режим вынужденных колебаний. Этот режим устанавливается через несколько периодов повторения импульсов, характеризуется постоянной амплитудой. Фурье-преобразование для средней координаты имеет выраженную основную спектральную компоненту на частоте $\Omega = 1$, постоянная составляющая и высшие гармоники очень слабые. Выполняя точечные преобразования и используя теорему Кенинга об устойчивости, можно убедиться в существовании устойчивого аттрактора. Остальные исследования карты уровней плотности вероятности, временных реализаций для средних координаты и скорости, а также фазовых траекторий на плоскости средних дополняют картину колебаний. Можно также отметить неизменность формы волнового пакета при его смещении во времени. Произведение неопределенностей координаты и скорости сохраняет неизменное минимизированное значение, равное 0.5. Таким образом, устанавливается режим когерентных колебаний. Обозначая максимальную среднюю скорость на предельной траектории V_c и варьируя начальную скорость пакета так, чтобы $|V_0| > |V_c|$ с неизменным значением F_0 , были изучены переходные участки и установление колебаний с постоянной амплитудой. Фазовая траектория на плоскости $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle)$ переходит к предельной и практически совпадает с траекторией при $V_0 = 0$. Отсюда

следует независимость установившегося режима колебаний от начальной скорости. Увеличение силы F_0 в 10 и 20 раз оставляет динамику квантового волнового пакета регулярной, Фурье-спектры для средней координаты как функции времени останутся дискретными.

Влияние ангармонизма на вынужденные колебания в системе с квадратичным потенциалом $U=0.5\zeta^2$ и трением рассматривалось для потенциальной добавки $0.25\zeta^4$. Решение стационарного уравнения Шредингера показывает что спектр энергий является существенно неэквидистантным: разности энергий равны $\Delta\varepsilon_1=\varepsilon_2-\varepsilon_1=1.4$, $\Delta\varepsilon_2=\varepsilon_3-\varepsilon_2=1.67$. Величина $\Delta\varepsilon_1$ соответствует классической частоте Ω_1 ангармонического осциллятора. Для нестационарной задачи без трения и внешней импульсной силы с начальным гауссовым пакетом с $\langle\zeta\rangle=0$, $\langle V\rangle=V_0=-1$ в системе возбуждаются колебания с несколькими частотами. Фурье-спектр средней координаты содержит две наиболее интенсивные спектральные линии с $\Omega_1=\Delta\varepsilon_1$, $\Omega_2=\Delta\varepsilon_2$. Для нестационарной задачи с внешней импульсной силой при $F_0=-10$ и трением ($k=0.5$) и периодом повторения импульсов $2\pi/\Delta\varepsilon_1$ волновой пакет колеблется с небольшим изменением своей формы, что обусловлено ангармонизмом. Ангармонизм влияет на значения стандартных отклонений для координаты и скорости. Произведение стандартных отклонений (произведение неопределенностей) не является минимизированным. Фурье-спектр содержит много высших гармоник $n\Omega_1$, интенсивность которых мала.

В данной главе также рассматривается влияние случайного воздействия на колебания. Как известно, броуновское движение может быть описано при помощи стоковой силы и случайной ланжевеновской силы, поэтому дан анализ динамических свойств пространственно ограниченного осциллятора, подверженного действию силы трения и ланжевеновской случайной силы. Следует отметить появление шумовой составляющей в Фурье-спектре средней координаты. Непрерывная составляющая спектра при случайной силе, характеризующей окружающую среду, может рассматриваться как неизбежный спутник при реализации тех или иных функций управления квантовыми волновыми пакетами и их динамикой.

Влияние внешней периодической силы на колебания в системе с двойной ямой исследовано на основе потенциала $U_{ext}=-F_0\zeta\sin(\Omega_{ext}\tau)$, где F_0 и Ω_{ext} - амплитуда и частота внешней силы. Частота внешнего воздействия выбирается в соответствии со спектром стационарной задачи. Разность $\Delta\varepsilon_{21}$ соответствует частоте перехода (релокализации) из одной ямы в другую, обусловленного туннелированием, величина $\Delta\varepsilon_{32}$ соответствует частоте мелкомасштабных осцилляций в одной из ям. Если высота барьера относительно мала, а также малы сила F_0 и k , то при $\Omega_{ext}=\Delta\varepsilon_{21}$ в частотном

отклике для средней координаты ярко выражен пик $F_{\langle \zeta \rangle}(\Delta \varepsilon_{21})$, компонента для мелкомасштабных осцилляций $F_{\langle \zeta \rangle}(\Delta \varepsilon_{32})$ выражена очень слабо. Если частота внешнего воздействия совпадает с частотой мелкомасштабных осцилляций, а остальные параметры остаются прежними, то картина динамических закономерностей изменяется. Амплитуда колебаний заметно ниже, чем в предыдущем режиме колебаний. Фурье-спектр частотного отклика для средней координаты имеет интенсивный пик $F_{\langle \zeta \rangle}(\Delta \varepsilon_{32})$, но его величина примерно на два порядка ниже пика в предыдущем случае (когда $\Omega_{ext} = \Delta \varepsilon_{21}$). При таком способе возбуждения пик на частоте $\Delta \varepsilon_{21}$ также обнаруживается, но он очень мал. Если высоту барьера заметно увеличить (например, в пять раз), то характер колебаний изменяется. Теперь величина $F_{\langle \zeta \rangle}(\Delta \varepsilon_{21})$ уменьшается почти на порядок, а $F_{\langle \zeta \rangle}(\Delta \varepsilon_{32})$ увеличивается почти втрое. Полагая величины k и F_0 прежними, выбирая $\Omega_{ext} = \Delta \varepsilon_{21}$ и рассматривая генерацию колебаний из начального состояния, соответствующего основному стационарному, можно получить режим, отличающийся от предыдущих. Мелкомасштабные колебания $\langle V \rangle$ очень слабые по амплитуде, крупномасштабные колебания средней координаты на частоте релокализации происходят практически в левой половине квантовой системы, они слегка промодулированы мелкомасштабными колебаниями. Эта картина соответствует карте уровней плотности вероятности, на которой основная область локализации находится в левой части. Если частота внешнего воздействия $\Omega_{ext} = \Delta \varepsilon_{32}$, то есть равна частоте мелкомасштабных осцилляций, то динамическая картина процессов опять изменяется. Частотный отклик содержит лишь один спектральный пик на частоте Ω_{ext} . На карте уровней плотности вероятности имеет место симметричное распределение её относительно оси системы, происходят очень слабые колебания, определяющие характер колебаний средней координаты и средней скорости. Представленные здесь режимы движения говорят об их многообразии, но не исчерпывают других видов.

В четвертой главе рассматривается квантовая система, включающая квадратичный классический потенциал, ограниченный непроницаемыми стенками, а также трение и обратную связь в виде: $U_{oc}(\tau) = [-F_0 \zeta, \tau \in (\tau_s, \tau_s + \Delta \tau); 0, \tau \notin (\tau_s, \tau_s + \Delta \tau)]$. Этот потенциал определяет силу F_0 , действующую на промежутке $\tau_s < \tau < \tau_s + \Delta \tau$, где $\Delta \tau$ есть длительность действия силы. В качестве моментов τ_s выбирались такие, когда система проходит через равновесное состояние, характеризующееся средними значениями $\langle \zeta \rangle = 0$, $\langle V \rangle < 0$.

Вначале была рассмотрена классическая задача с обратной связью. В этом случае колебания носили регулярный характер в широком диапазоне значений диссипативного коэффициента и силы обратной связи. Затем была рассмотрена квантовая задача с

умеренными значениями силы и коэффициента трения. В характере динамического поведения средних величин следует отметить аналогию с классическим осциллятором и выполнение принципа соответствия. Произведение неопределенностей здесь является минимизированным, а колебания остаются регулярными при различных рассмотренных скоростях гауссова пакета.

Возникает вопрос о динамических свойствах системы при изменении силы F_0 и коэффициента трения k . Изменяя одну из этих величин при фиксированном значении другой, можно реализовать переход к колебаниям более сложного вида, чем рассмотренные в предыдущем случае. Здесь представлены результаты численного моделирования при достаточно высоком значении F_0 и варьируемой величине k . Последовательность моментов времени τ_s , в которые «включается» сила F_0 , может генерировать неодинаковые промежутки времени $\Delta\tau_s = \tau_{s+1} - \tau_s$, подчиняющиеся определённым закономерностям и распределениям по величине $\Delta\tau_s$. Как и раньше, сила F_0 «включалась» в моменты времени τ_s , соответствующие $\langle\zeta\rangle=0$ и $\langle V\rangle\leq 0$. В зависимости от величины k динамические режимы можно условно разделить на две группы: одну из них при $k > 0.165$, другую при $k \leq 0.165$. Значение $k = 0.165$ можно назвать критическим, т. к. при этом значении происходят заметные качественные изменения в динамике колебаний. Наиболее простая зависимость $\Delta\tau_s(\tau_s)$ имеет место для $k = 0.167$. На начальном промежутке времени постепенно $\Delta\tau_s(\tau_s)$ скачками уменьшаются, затем спустя некоторое время спадание замедляется и зависимость $\Delta\tau_s(\tau_s)$ выходит почти на прямую, т. е. практически $\Delta\tau_s$ становятся постоянными. Промежутки $\Delta\tau_s$ определяют соответствующую частоту $\Omega = 2\pi / \Delta\tau_s$. При увеличении k , например, при $k = 0.2$ функциональная зависимость $\Delta\tau_s(\tau_s)$ имеет сходный вид с предыдущей формой для 0.167, однако величина $\Delta\tau_s$ спадает до другого значения. При $k = 0.5$ практически все промежутки $\Delta\tau_s$ одинаковы, т. е. характеризуют один и тот же период колебаний.

После приведенного краткого обсуждения функциональных зависимостей $\Delta\tau_s(\tau_s)$ для группы с $k > 0.165$, можно перейти к граничной величине $k = 0.165$, а затем для $k < 0.165$. В отличие от предыдущего расчета, характер зависимости усложняется (рис. 5). Теперь можно отметить три участка для τ_s . На этих участках происходят скачкообразные уменьшения величин $\Delta\tau_s$, т.е. последующие значения $\Delta\tau_{s+1}$ меньше предыдущих $\Delta\tau_s$ для подавляющего числа точек. Однако возможны отдельные точки (значения τ_s) или набор их, нарушающие это правило, при этом отклонения в этих случаях очень малы, а затем спад значений продолжается. В среднем на этих участках функциональную зависимость $\Delta\tau_s(\tau_s)$ можно назвать монотонно убывающей. На

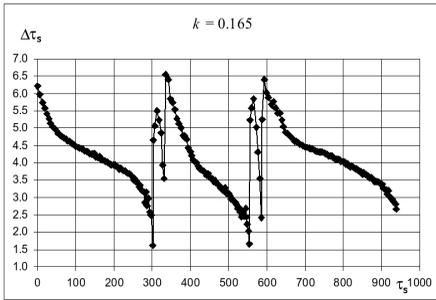


Рис. 5. $\Delta\tau_s(\tau_s)$ при $k = 0.165$

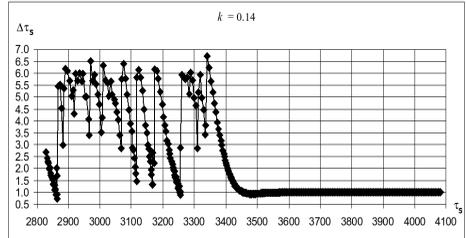


Рис. 6. $\Delta\tau_s(\tau_s)$ при $k = 0.14$

каждом из трех участков уменьшение $\Delta\tau_s$ происходит до некоторой минимальной величины. Однако монотонно убывающие участки перемежаются участками малой длительности по времени, которые имеют восходящую и нисходящую ветви, своего рода всплески. С последующим уменьшением коэффициента трения k увеличивается число убывающих участков и всплесков на одном и том же временном интервале, а расстояния между минимальными значениями $\Delta\tau_s$ (или максимумами) уменьшаются. При увеличении длины временной реализации для $k = 0.165, 0.16$ характер функциональных зависимостей $\Delta\tau_s(\tau_s)$ сохраняется, однако, для параметра $k = 0.14$ происходит переход функциональной зависимости $\Delta\tau_s(\tau_s)$ на пологий участок (рис. 6). Расчеты средних значений $\langle\zeta\rangle, \langle V\rangle$ для $k = 0.165$ дают картину колебаний с переменным периодом. Следует отметить наличие вариации амплитуд $\langle\zeta\rangle, \langle V\rangle$ при уменьшении периода $\Delta\tau_s$, а также при скачкообразном увеличении периода $\Delta\tau_s$. Произведение стандартных отклонений $\sigma_\zeta\sigma_V$ существенно возрастает по сравнению с предыдущим режимом колебаний ($k = 0.167$). Пределы изменений стандартных отклонений значительно больше, чем в предыдущем режиме и, тем более, когда $k \geq 0.2$. Несмотря на очень маленькое уменьшение $\Delta k = 0.002$ по сравнению с режимом движения при $k = 0.167$, Фурье-спектр колебаний $\langle\zeta\rangle$ существенно видоизменяется, он всюду плотно заполняет частотный диапазон (рис. 7). Увеличение временного промежутка вдвое не изменяет характера заполнения указанного частотного диапазона, расстояние между соседними спектральными линиями соответствует минимальной частоте разрешения $\Omega_m = 2\pi/T$, где T – полный временной промежуток реализации колебательного процесса для $\langle\zeta\rangle$. Фазовая траектория представлена на рис. 8. Расчеты автокорреляционной функции Науенберга и ее Фурье-спектра подтверждают эту картину режимов движения. Если трение отсутствует, колебания остаются сложными, а всюду плотный Фурье-спектр имеет максимумы в окрестностях характеристической частоты осциллятора и некоторой частоты перехода для свободной частицы в яме.

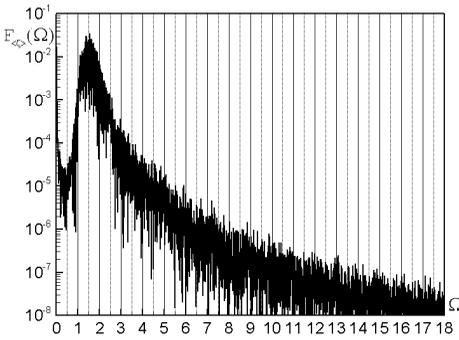


Рис. 7. Фурье-спектр средней координаты при $k = 0.165$

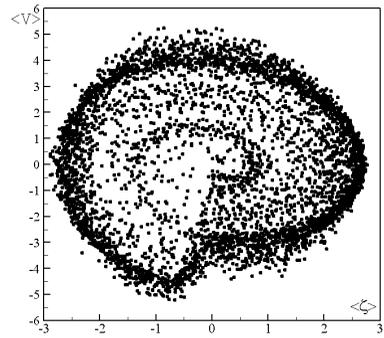


Рис. 8. Фазовый портрет при $k = 0.165$

В пятой главе представлен обзор известных численных методов, применяемых для получения решений стационарного одномерного уравнения Шредингера (задача на собственные значения), нестационарного уравнения Шредингера (одномерного и двумерного), метод расчета Фурье-спектров различных динамических величин. Также в данной главе сформулирован метод установления по псевдовремени для решения нелинейного дифференциального уравнения в частных производных (уравнение ШЛК в одномерном и двумерном случаях).

Уравнение ШЛК (1) является нелинейным по ψ , и, следовательно, его численное интегрирование требует использования итерационного метода. Одним из наиболее часто используемых в виду его простоты реализации и возможности применить к практически любым нелинейным уравнениям является метод простых итераций. Для начала запишем уравнение (1) в дискретизированном по схеме Кранка-Никольсона виде:

$$i(\psi^{n+1} - \psi^n) / \Delta \tau = \hat{H}_\Sigma \psi^{n+1/2}, \quad (3)$$

где $\hat{H}_\Sigma = \hat{H} - ik/2 (\ln(\psi^{n+1/2} / \psi^{*n+1/2}) - \ln(\psi^{n+1/2} / \psi^{*n+1/2}))$, $\psi^{n+1/2} = (\psi^{n+1} + \psi^n) / 2$. Схема Кранка-Никольсона даёт второй порядок точности по времени. Дискретное уравнение (3) является неявным по времени, и, следовательно, при наличии дополнительных нелинейных по ψ слагаемых (как в рассматриваемом случае) обладает хорошей устойчивостью и не требует малых шагов $\Delta \tau$. Также данная аппроксимация сохраняет нормировку волновой функции во времени. Задача заключается в том, чтобы по известной волновой функции на временном слое n найти с помощью итераций значение на слое $n+1$. Можно использовать метод простых итераций, однако, как показывает практика, целесообразней применить так называемый метод установления по псевдовремени, широко использующийся в вычислительной гидродинамике для решения уравнений Навье-Стокса, и также являющийся разновидностью метода простых итераций. Добавим к уравнению (3) дополнительную производную по псевдовремени $\tilde{\tau}$ и дискретизируем её с первым порядком неявным методом:

$$i(\psi^{n+1, k+1} - \psi^{n+1, k}) / \Delta \tilde{\tau} + i(\psi^{n+1, k+1} - \psi^n) / \Delta \tau = \hat{H}_{\Sigma} \psi^{n+1/2, k+1}. \quad (4)$$

Уравнение (3) будет решено на временном слое $n+1$, если в результате итераций (4) по псевдовремени производная $(\psi^{n+1, k+1} - \psi^{n+1, k}) / \Delta \tilde{\tau}$ обратится в ноль. Данный метод обладает следующими достоинствами: точность решения уравнения не зависит от $\Delta \tilde{\tau}$, временная и пространственная дискретизация уравнения может быть выполнена произвольным способом с любой степенью точности вне зависимости от итерационного метода, точность аппроксимации по псевдовремени не играет роли. Для аппроксимации пространственных производных используется конечно-разностный метод.

Результаты и выводы

1) Как результат проведенных исследований следует отметить расширение области применения уравнения ШЛК. Если раньше оно применялось преимущественно к осциллятору с квадратичным потенциалом, то теперь вычисления были проведены для пространственно-ограниченного осциллятора с трением, осциллятора с учетом дополнительных ангармонических потенциальных слагаемых, пропорциональных координате в третьей и четвертой степенях (осциллятор Дуффинга, осциллятор с двойной ямой), для двумерной задачи с дифракцией. В этих исследованиях отсутствовали нефизические эффекты, например, нарушение принципа причинности или возникновение сверхсветовых скоростей квантовых пакетов. Напротив, все решения удовлетворяли условиям нормировки, законам сохранения для средних и принципу соответствия. Поэтому можно сделать вывод, что уравнение ШЛК применимо и для других квантовых систем.

2) Впервые рассмотрена модель квантового осциллятора с обратной связью, являющаяся аналогом модели классических часов. В такой модели наряду с режимами когерентных колебаний возможен режим хаотических колебаний.

3) Показано существование режимов когерентных колебаний в диссипативных системах с внешней вынуждающей силой.

Цитируемая литература

1. Ford G.W., Mazur P. Statistical Mechanics of Assemblies of Coupled Oscillators // J. Math. Phys. – 1965. – Vol. 6, № 4. – P. 504–515.
2. Kostin M.D. On the Schrödinger-Langevin equation // J. Chem. Phys. – 1972. – Vol. 57, № 9. – P. 3589–3591.
3. Kostin M.D. Friction and Dissipative Phenomena in Quantum Mechanics // J. Stat. Phys. – 1975. – Vol. 12, № 2. – P. 145–151.
4. Wagner Heinz-Jürgen. Schrödinger quantization and variational principles in dissipative quantum theory // Zeitschrift für Physik B. – 1994. – Vol. 95. – P. 261–273.
5. Albrecht K. A new class of Schrödinger operators for quantized friction // Phys. Lett. B. – 1975. – Vol. 56, № 2. – P. 127–129.
6. Doebner H.-D., Goldin G.A. Introducing nonlinear gauge transformation in a family of nonlinear Schrödinger equations // Phys. Rev. A. – 1996; V.54, №5. – P. 3764–3771.
7. Wysocki R.J. Hydrodynamic quantization of mechanical systems // Phys. Rev. A. – 2005; V.72, №3. – P. 032113 (24 pages).

Список публикаций в журналах, рекомендуемых ВАК

1. Sanin A.L., Smirnovsky A.A. Oscillatory motion in confined potential systems with dissipation in the context of the Schrödinger-Langevin-Kostin equation // Phys. Lett. A. – 2007 – Vol. 372, № 1. – P. 21–27.
2. Санин А.Л., Смирновский А.А. Вынужденные колебания квантовых волновых пакетов в системе с трением, квадратичным потенциалом и стенками // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2007. – Т. 15. № 4. – С. 68–83.
3. Санин А.Л., Смирновский А.А. Квантовый пространственно-ограниченный осциллятор в системе с трением и обратной связью // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2008. – Т. 16, № 2. – С. 18–34.
4. Багманов А.Т., Санин А.Л., Смирновский А.А. Динамика квантовых волновых пакетов в системе с потенциальными ямами и барьером // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2006. – №6-1. – С. 124–139.
5. Смирновский А.А. Когерентное и хаотическое движение в квантовых системах с обратной связью // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2008. – №3. – С. 80–87.

Список публикаций в других журналах и трудах конференций

6. Bagmanov A.T., Sanin A.L., Smirnovsky A.A. Dynamical tunneling in system with non-monotonous potential and impenetrable walls // Proceedings of SPIE. – 2006. – Vol. 6253. – P. 625303(1-9).
7. Smirnovsky A.A., Sanin A.L. Influence of dissipation on quantum wave dynamics in confined potential systems // Proceedings of SPIE. – 2007. – Vol. 6597. – P. 659704(1-7).
8. Sanin A.L., Smirnovsky A.A., Bagmanov A.T. Motion, tunneling, and quantum revivals of wave packets into systems with distributed potential and boundary walls // Proceedings of SPIE. – 2007. – Vol. 6597. – P. 659705(1-5).
9. Smirnovsky A.A., Sanin A.L. Temporal resonances and structures in quantum systems under dissipation // Proceedings of SPAS jointly with UWM. 5-8 July 2006, Olsztyn, Poland. – Olsztyn, 2006. – P. 43–47.
10. Sanin A.L., Smirnovsky A.A., Bagmanov A.T., Motion, tunneling and quantum revivals of wave packets into systems with distributed potential and boundary walls // Proceedings of SPAS jointly with UWM. 5-8 July 2006, Olsztyn, Poland. – Olsztyn, 2006. – P. 27–32.
11. Багманов А.Т., Санин А.Л., Смирновский А.А. Динамическое туннелирование в квантовых системах с полиномиальными потенциалами // В кн. “Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования, образование” [Сб. трудов под ред. А.П. Кудинова и др.] – СПб: Изд. СПбГПУ, 2006. – Т. IV. – С. 79–80.
12. Смирновский А.А. Уравнение Шредингера-Ланжевена-Костина с диссипативным слагаемым в интегральной форме // Материалы докладов XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» / Отв. ред. И.А. Алешковский, П.Н. Костылев. [Электронный ресурс] – М.: Издательский центр факультета журналистики МГУ им. М.В. Ломоносова, 2007.
13. Смирновский А.А. Динамика квантовых систем с трением и обратной связью // Материалы докладов XV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» / Отв. ред. И.А. Алешковский, П.Н. Костылев, А.И. Андреев. [Электронный ресурс] – М.: Издательство МГУ; СП МЫСЛЬ, 2008.
14. Санин А.Л., Смирновский А.А. Управление движением квантовых волновых пакетов и когерентностью в системах с диссипацией // Молодые ученые — промышленности Сев.-Зап. региона: материалы конференций Политехнического симпозиума. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2007. – С. 52–53.
15. Смирновский А.А. Неявный итерационный метод для решения одномерного уравнения Шредингера-Ланжевена-Костина // Молодые ученые — промышленности Сев.-Зап. региона: материалы конференций Политехнического симпозиума. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2006.

16. Смирновский А.А., Санин А.Л. Квантовый осциллятор с трением // Молодые ученые – промышленности Сев.-Зап. региона: материалы семинаров Политехнического симпозиума. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2005. – С. 100.
17. Смирновский А.А., Санин А.Л. Квантовый осциллятор при наличии диссипации // Тезисы докладов. Демидовские чтения на Урале (1-3 марта 2006 г.). – Екатеринбург, 2006. – С. 102–103.
18. Санин А.Л., Смирновский А.А. Дифракция квантового пакета волн на плоской щели // Матер. XII Всерос. конф. по проблемам науки и высшей школы "Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах", 14 мая 2008. – СПб: Изд. СПбГПУ, 2008. – С. 102–104.
19. Багманов А.Т., Санин А.Л., Смирновский А.А., Ульянова В.Г. Квантовая динамика с малым числом степеней свободы: вычислительный эксперимент // Матер. X Всероссийской конф. по проблемам науки и высшей школы "Фундаментальные исследования в технических университетах" (18-19 мая 2006). – СПб: Изд. СПбГПУ, 2006. – С. 120–121.
20. Санин А.Л., Смирновский А.А. Шредингеровские уравнения с диссипативными слагаемыми и их приложения // Матер. XI Всерос. конф. по проблемам науки и высшей школы "Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах" (18-19 мая 2007). – СПб: Изд. СПбГПУ, 2007. – С. 158.
21. Санин А.Л., Смирновский А.А. Квантовая динамика и наноприборы в курсах теоретической физики // Матер. XIV межд. науч.-метод. конф. "Высокие интеллектуальные технологии и инновации в образовании и науке" (14-15 февраля 2007). – СПб: Изд. СПбГПУ, 2007. – Т. 1. – С. 224–225.