

**ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ
КВАНТОВЫХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ В СИСТЕМЕ
С ТРЕНИЕМ, КВАДРАТИЧНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ
И НЕПРОНИЦАЕМЫМИ СТЕНКАМИ**

А.Л. Санин, А.А. Смирновский

В рамках уравнения Шредингера – Ланжевена – Костина исследована одномерная диссипативная система с квадратичным потенциалом, распределенным между стенками ямы, и подверженная импульсной накачке. Численное моделирование распространения квантовых волновых пакетов, динамических средних, частотного отклика, отображения Пуанкаре демонстрирует установившийся колебательный режим движения пакетов. Проводится сравнение с классическими аналогами.

Введение

Исследование квантовых динамических закономерностей имеет фундаментальное значение для развития физики, химии и нанотехнологий. Современные достижения лазерной импульсной фемто- и аттосекундной техники позволяют проводить экспериментальные исследования динамики микрочастицы на разных пространственных масштабах. Поэтому возрос интерес к теоретическим исследованиям процессов локализации и фрагментации квантовых волновых пакетов, когерентных колебаний, дифракции и туннелирования в простых модельных системах. В большинстве работ эти системы рассматривались как изолированные от окружающей среды. Для описания изолированных систем используются различные формы уравнений движения, например, нестационарное уравнение Шредингера, квантовое уравнение Гамильтона – Якоби. Влияние окружающей среды на динамику микрочастицы может быть учтено различными способами. Один из них состоит в использовании метода матрицы плотности. Однако, если не требуется полного описания системы, окружающей среды и взаимодействия между ними, то можно перейти к упрощенному, более краткому описанию. Оно состоит в том, чтобы ввести в уравнение квантовой динамики для рассматриваемой системы один или несколько параметров, характеризующих окружающую среду. Так появилось уравнение Гейзенберга – Ланжевена для оператора импульса [1], которое послужило основой для формулировки уравнения Шредингера – Ланжевена – Костина (ШЛК) [2]. 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 рассматриваемых ниже статьях. Уравнение ШЛК без случайной силы имеет в качестве классического аналога уравнение движения с диссипативной силой, пропорциональной скорости. Уравнение ШЛК детально обсуждалось в рамках лагранжевой полевой теории в обзоре [3]. Здесь также сравнивалось гидродинамическое представление уравнения ШЛК с уравнениями классической гидродинамики. Другие подходы к формулировке диссипативных слагаемых, вводимых в уравнение Шредингера, рассматривались в статьях [4, 5]. При определенных значениях параметров этих диссипативных слагаемых наблюдалось структурное сходство с уравнением ШЛК. В статье [6] формулируется семейство нелинейных уравнений Шредингера с диссипативными слагаемыми и показывается их связь с уравнением ШЛК. Здесь отмечается фундаментальное значение уравнения Шредингера с диссипативными слагаемыми для исследования необратимых процессов. Гидродинамический метод квантования систем с диссипацией, предложенный в статье [7], позволяет также воспроизвести уравнение ШЛК. Уравнение ШЛК, а также соответствующие ему гидродинамические уравнения применялись для решения конкретных задач, например, в статьях [8, 9].

Классическая теория колебаний динамических систем с диссипацией разработана в большей мере, чем квантовая. К настоящему времени существует множество статей и монографий по классической теории колебаний, например [10] – [16]. Вместе с тем, переход к наноразмерам и фемтосекундным импульсам в радиоэлектронике побуждает к детальным исследованиям квантовых динамических систем с диссипацией и к разработке теории колебаний в этой области.

Настоящая статья посвящена численному моделированию динамики микрочастицы, подверженной действию силовых полей и силы трения. Рассматривается одномерная система, ограниченная непроницаемыми стенками. В начальный момент времени микрочастице сопоставляется узкий гауссов пакет с конечной скоростью. Исследуемая динамическая модель может применяться для очень малых пространственных масштабов, вплоть до атомных. В первом разделе излагаются основные уравнения и допущения, во втором – рассматриваются собственные колебания квантового осциллятора. Третий раздел посвящен вынужденным колебаниям при импульсном силовом воздействии на квантовый волновой пакет. В последнем разделе обсуждаются результаты численного моделирования.

1. Основное уравнение и расчетные формулы

Уравнение Шредингера – Ланжевена – Костина, записанное в безразмерном виде, можно представить как

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

где безразмерные величины определяются следующим образом:

$$\zeta = \frac{x}{b_\delta}, \quad \tau = \frac{t}{t_\delta}, \quad \tilde{U}_\Sigma = \frac{U_\Sigma}{U_\delta}, \quad \tilde{\psi} = \frac{\psi}{\psi_\delta}, \quad k = \frac{f}{m_e \omega_\delta}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{\tau_\delta} \frac{\partial}{\partial \tau}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{b_\delta^2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2},$$

а единицы измерения равны

$$b_\delta = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega_\delta}}, \quad t_\delta = \omega_\delta^{-1}, \quad U_\delta = \frac{\hbar^2}{m_e b_\delta^2}, \quad \psi_\delta = \sqrt{b_\delta^{-1}}.$$

Здесь x, t – координата и время, соответственно; f – диссипативный коэффициент, ψ – волновая функция; m_e, \hbar – масса частицы и постоянная Планка, соответственно. Безразмерная комплексно-сопряженная волновая функция обозначена как $\tilde{\psi}^*$, i – мнимая единица. Рассматриваемая квантовая система ограничена непроницаемыми стенками в точках $\zeta = \pm \zeta_L$, где $\zeta_L = L/b_\delta$, L – полуширина системы. Величина \tilde{U}_Σ состоит из двух слагаемых

$$\tilde{U}_\Sigma = \frac{1}{2} \zeta^2 + \tilde{U}_{\text{ext}}. \quad (2)$$

Первое слагаемое в (2) определяет ограниченный квадратичный потенциал на отрезке $-\zeta_L \leq \zeta \leq \zeta_L$. Второе слагаемое в (2) характеризует импульсную накачку

$$\tilde{U}_{\text{ext}}(\zeta, \tau) = \begin{cases} -\tilde{F}_0 \zeta, & \tau \in (nT, nT + \Delta\tau), \\ 0, & \tau \notin (nT, nT + \Delta\tau). \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\tilde{F}_0 = F_0/F_\delta$, F_0 – классическая сила, $F_\delta = U_\delta/b_\delta$, T – период повторения импульса, n – целое число.

Слагаемое в (1), включающее множитель k , характеризует диссипативные свойства системы. Величина $\ln(\tilde{\psi}/\tilde{\psi}^*)$ может быть представлена в виде

$$\ln \frac{\tilde{\psi}}{\tilde{\psi}^*} = i (2 \arg(\tilde{\psi}) + 2n\pi), \quad (4)$$

где $\arg(\tilde{\psi}) = \arctg(\text{Im}\tilde{\psi}/\text{Re}\tilde{\psi})$ есть главное значение фазы. Необходимо отметить, что физически корректные решения имеют место, когда фаза является непрерывной функцией координаты ζ . Символ $\langle \rangle$ означает среднее значение, так что

$$\langle \ln \frac{\tilde{\psi}}{\tilde{\psi}^*} \rangle = \int \tilde{\psi}^* \ln \frac{\tilde{\psi}}{\tilde{\psi}^*} \tilde{\psi} d\zeta. \quad (5)$$

Ниже использованы безразмерные величины для плотности вероятности N и полевой скорости V

$$N = \tilde{\psi}^* \tilde{\psi}, \quad V = \frac{1}{2iN} \left(\tilde{\psi}^* \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \zeta} - \tilde{\psi} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial \zeta} \right). \quad (6)$$

Условие нормировки для волновой функции $\tilde{\psi}$ может быть записано в виде

$$\int_{-\zeta_L}^{\zeta_L} N d\zeta = 1. \quad (7)$$

Расчетные формулы для средних значений динамических переменных и функций от них имеют вид

$$\begin{aligned}\langle \zeta \rangle &= \int_{-\zeta_L}^{\zeta_L} \tilde{\psi}^* \zeta \tilde{\psi} d\zeta, \quad \langle V \rangle = \int_{-\zeta_L}^{\zeta_L} \tilde{\psi}^* \left(-i \frac{\partial}{\partial \zeta} \right) \tilde{\psi} d\zeta, \\ \langle \tilde{T} \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\zeta_L}^{\zeta_L} \left| \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \zeta} \right|^2 d\zeta, \quad \langle \tilde{U}_\Sigma \rangle = \int_{-\zeta_L}^{\zeta_L} \tilde{\psi}^* \tilde{U}_\Sigma \tilde{\psi} d\zeta.\end{aligned}\tag{8}$$

Здесь $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$ – средние значения координаты и скорости, соответственно; $\langle \tilde{T} \rangle$, $\langle \tilde{U}_\Sigma \rangle$ – средние значения кинетической и потенциальной энергий, соответственно. В отдельных случаях проводились вычисления средней полной энергии $\langle \tilde{E} \rangle$ как суммы $\langle \tilde{T} \rangle$, $\langle \tilde{U}_\Sigma \rangle$. Величины $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$, $\langle \tilde{T} \rangle$, $\langle \tilde{U}_\Sigma \rangle$ являются безразмерными. Для анализа соотношения неопределенностей проведены вычисления среднеквадратичных отклонений координаты и скорости $\langle (\Delta \zeta)^2 \rangle$, $\langle (\Delta V)^2 \rangle$, а также стандартных отклонений, определяемых как

$$\sigma_\zeta = \sqrt{\langle (\Delta \zeta)^2 \rangle}, \quad \sigma_V = \sqrt{\langle (\Delta V)^2 \rangle}.\tag{9}$$

Произведение $\sigma_\zeta \sigma_V$ описывает соотношение неопределенностей как функцию времени. С использованием метода дискретного преобразования Фурье [17] проанализированы квадраты модулей

$$F_W(\Omega) = |\Phi_W(\Omega)|^2\tag{10}$$

как функции Ω . Здесь W – некоторая переменная времени, $\Phi_W(\Omega)$ – фурье-преобразование, $\Omega = \omega/\omega_\delta$, ω – частота процесса. Были также вычислены квадраты модулей фурье-компонент для $W = \langle \zeta \rangle$ и $W = N(0, \tau)$. Граничные условия на стенках системы и начальное условие задавались в виде

$$\tilde{\psi}(\pm \zeta_L, \tau) = 0, \quad \tilde{\psi}(\zeta, \tau = 0) = \tilde{\psi}_0(\zeta).\tag{11}$$

Было проведено численное интегрирование уравнения ШЛК при заданных начальном и граничных условиях. Поскольку уравнение является нелинейным, использовался итерационный конечно-разностный метод установления по псевдовремени, который является аналогом метода простых итераций. Производные по координате аппроксимировались со вторым порядком точности, временные производные также вычислялись со вторым порядком точности за исключением тех моментов времени, где внешний потенциал \tilde{U}_{ext} меняется скачком (первый порядок аппроксимации). В процессе вычислений контролировалось условие нормировки (7), которое сохранялось с высокой степенью точности (менее 10^{-6}). Реализованный численный метод также тестировался на простейших задачах (например, для гармонического осциллятора). Для получения приведенных ниже результатов в расчетах использовалась равномерная пространственно-временная сетка с шагом по времени $\Delta \tau_{\text{сетки}} = \pi/1024$ и с 400 узлами по координате.

2. Собственные колебания пространственно ограниченного квантового осциллятора

Специфика рассматриваемой квантовой системы, как отмечалось выше, состоит в том, что квадратичный потенциал задан на конечном отрезке $[-\zeta_L; \zeta_L]$ между стенками системы. Как известно [18], энергетический спектр такой системы становится неэквидистантным. При малых номерах квантовых состояний он с высокой степенью точности совпадает со спектром квантового гармонического осциллятора. Однако с ростом номера состояния происходят изменения в структуре спектра. При достаточно больших номерах можно ожидать переход к состояниям частицы в потенциальной яме без квадратичного потенциала. Характер спектров и динамика квантовых волновых пакетов при отсутствии диссипации изучалась нами ранее [19]. Обычный классический резонанс при периодическом импульсном воздействии на такой пространственно ограниченный осциллятор был исследован в деталях в работе [20]. Прежде чем перейти к изложению динамики квантовых волновых пакетов в диссипативной системе с импульсной накачкой, рассмотрим более простые режимы движения, когда импульсная накачка (3) «выключена» и трение отсутствует, то есть $\tilde{U}_{\text{ext}} = 0$, $k = 0$. В этих режимах характер динамических свойств зависит от начальных условий: отклонения пакета от состояния равновесия, начальной скорости и, соответственно, степени приближения средней координаты $\langle \zeta \rangle$ к ζ_L , то есть к стенкам системы. Рассмотрим простейший вариант начальных условий в форме гауссова пакета, размещенного в центре системы, но с малой начальной скоростью

$$\tilde{\psi}_0(\zeta) = A \exp\left(-\frac{1}{2}\zeta^2 + iV_0\zeta\right), \quad (12)$$

где A определяется из условия нормировки, а $V_0 \simeq \langle V \rangle$ характеризует скорость центра гауссова пакета в начальный момент времени. При малых скоростях V_0 можно организовать режимы колебательного движения, соответствующие или близкие к режиму квантового гармонического осциллятора на неограниченном интервале $(-\infty; \infty)$. В этих режимах колебания происходят на собственной частоте осциллятора $\Omega = 1$. Анализ реализаций и фурье-спектров динамических переменных и их средних подтверждают возможность таких колебаний, если V_0 достаточно мала. Простейший пример таких колебаний, когда осциллятор возбуждается при помощи одиночного импульса, рассмотрен для параметров системы: $\tilde{F}_0 = -0.5$, $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0$, начальный гауссов пакет соответствует основному состоянию, а начальная скорость $V_0 = 0$. Вычисления проведены для $\zeta \in [-4; 4]$, $\tau \in [0; 300]$. Длительность одиночного импульса накачки, включаемого в момент $\tau = 0$ и выключаемого в момент $\tau = \Delta\tau$, много меньше периода собственных колебаний, равного 2π . Реализации для средних значений координаты и скорости как функции времени даны на рис. 1, *a*, а фурье-преобразование временной зависимости средней координаты $\langle \zeta \rangle$ дано на рис. 1, *b*. В этом простом режиме отклонение $\langle \zeta \rangle$ от равновесного значения, равного нулю, много меньше полуширины системы ζ_L . Влияние стенок не сказывается на спектре колебаний, который имеет одну собственную частоту $\Omega = 1$ (см. рис. 1, *b*), фурье-компонента для средней координаты $F_{\langle \zeta \rangle}(1) \simeq 2.5 \cdot 10^{-3}$ является единственной спектральной линией. Рассматриваемому движению на фазовой

плоскости ($\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$) соответствует замкнутая траектория. Варьируя начальные условия, можно получить континуум фазовых траекторий, вложенных одна в другую.

Однако при увеличении начальной скорости V_0 или интенсивности импульса накачки до значений, при которых среднее значение $\langle \zeta \rangle$ становится сравнимым с ζ_L , характер временных реализаций $\langle \zeta \rangle$ и их фурье-спектров существенно изменяется. Например, для динамического режима, определяемого параметрами $\tilde{F}_0 = 0$, $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0$, $V_0 = -10$, временная реализация $\langle \zeta \rangle$ имеет области интенсивных колебаний, слабых колебаний, а также области, где они отсутствуют вовсе (рис. 2, а). Фурье-спектр колебаний становится сложным; функциональная зависимость $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ имеет широкополосный максимум и набор отдельных спектральных линий, огибающие которых также характеризуются максимумами (рис. 2, б). Проведенный анализ энергетических уровней λ_n стационарных состояний и разностей между соседними уровнями $\Delta\lambda_n$ показывает близость отдельных значений $\Delta\lambda_n$ к частотам спектра Ω временной зависимости $\langle \zeta \rangle$.

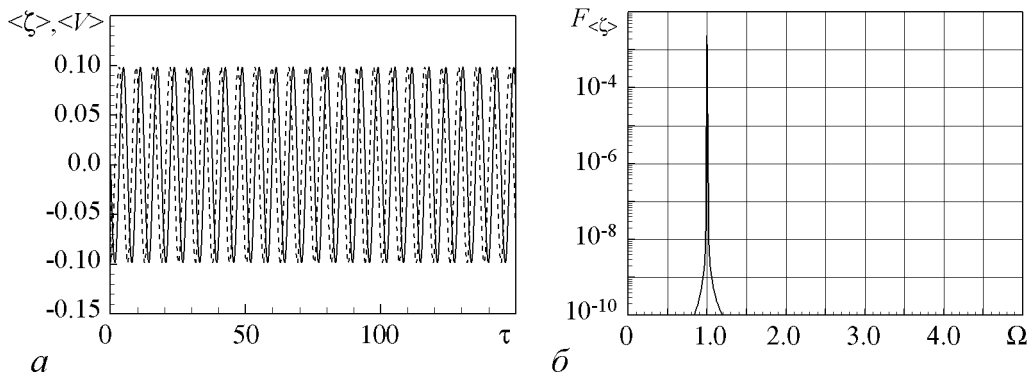


Рис. 1. Гармонические колебания пространственно ограниченного осциллятора при малой величине \tilde{F}_0 одиночного импульса: а – временные реализации $\langle \zeta \rangle$ (сплошная линия) и $\langle V \rangle$ (штриховая линия) с малым отклонением от равновесия, $\langle \zeta \rangle \ll \zeta_L$; стенки не оказывают существенного влияния на динамику колебаний; б – частотный отклик; точность расчета фурье-спектра достигает 10^{-8} (даже при такой точности не обнаружено сильное уширение спектральной линии)

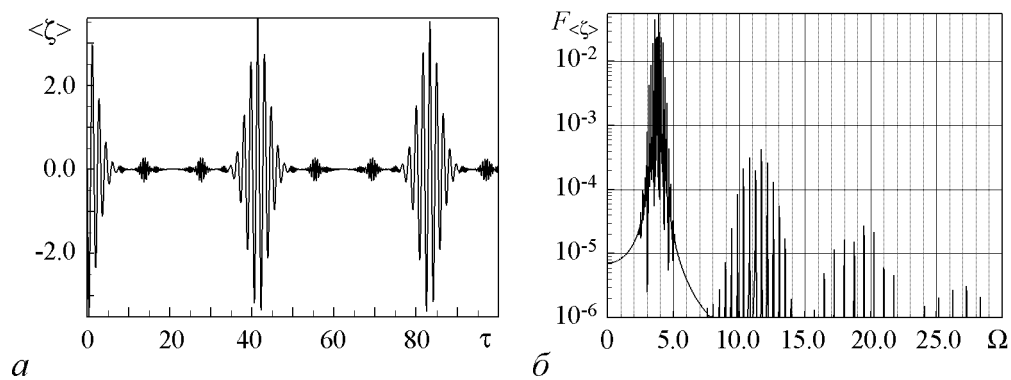


Рис. 2. Влияние стенок на спектр колебаний при высокой начальной скорости квантового пакета: а – структура временных колебаний, $\langle \zeta \rangle$ близко к ζ_L ; отметим присутствие в колебаниях биений, обусловленных большим числом спектральных компонент; б – формирование многочастотного спектра; частота осциллятора отсутствует

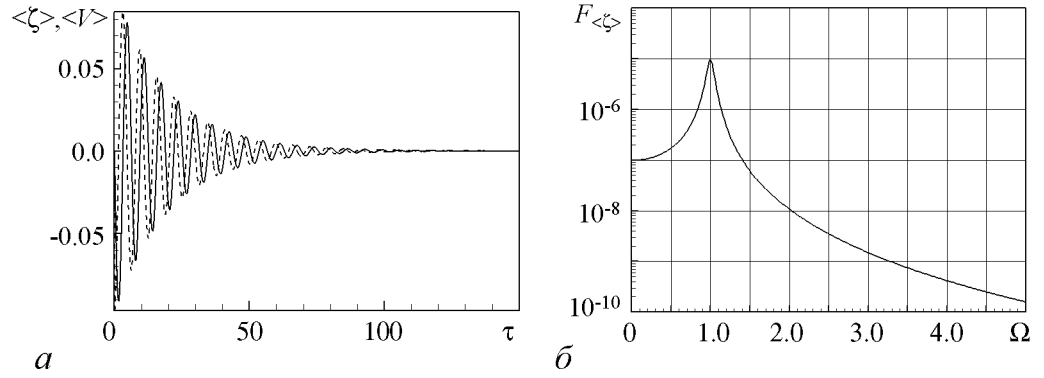


Рис. 3. Пространственно ограниченный осциллятор с трением в режиме слабых колебаний: *a* – затухание собственных колебаний средней координаты (сплошная линия) и средней скорости (штриховая линия) происходит по экспоненциальному закону аналогично классическому случаю; *б* – уширение спектральной линии

Имея эти результаты как исходные, можно перейти к изучению диссипативных динамических процессов. В качестве иллюстрации рассмотрим динамический режим, характеризующийся параметрами $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0.1$, $V_0 = 0$; осциллятор возбуждается под действием одиночного импульса с $\tilde{F}_0 = -0.5$. Временные реализации для $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$ и фурье-преобразование представлены на рис. 3, *a*, *б*, соответственно. Динамические средние $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$ стремятся к нулю. Как и в классической механике, имеем осциллятор с затуханием, отдельную спектральную линию с уширением на демпфированной частоте $\Omega_d = \sqrt{1^2 - (1/4)k^2}$. Система переходит в основное состояние, при этом произведение стандартных отклонений $\sigma_\zeta \sigma_V$ равно 0.5. Это соответствует минимизированной величине для основного состояния гармонического осциллятора. Аналогичные результаты были получены для осциллятора с трением на неограниченном интервале $(-\infty; \infty)$ в рамках уравнения Добнера – Голдина [21,22]. В этих работах были найдены точные аналитические решения и асимптотический переход к стационарному состоянию – «аттрактору в гильбертовом пространстве». В отличие от этих результатов мы развиваем теорию пространственно ограниченного осциллятора на отрезке $[-\zeta_L; \zeta_L]$ в рамках уравнения ШЛК. Следует отметить, что переход в основное стационарное состояние при разных V_0 изучался нами в статье [23] для ограниченного осциллятора с квадратичным потенциалом и в системе с двумя полиномиальными ямами.

3. Вынужденные колебания квантового волнового пакета

Теперь можно перейти к основной задаче, когда на систему действует импульсная накачка, представляемая формулой (3). Для сравнения с предыдущим результатом, когда включается одиночный импульс, сохраним значения параметров задачи $\tilde{F}_0 = -0.5$, $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0.1$. Период повторения импульсного воздействия $T = 2\pi$. Начальное условие осталось прежним, то есть в виде гауссова пакета с начальной нулевой скоростью. Динамический режим с указанными значениями параметров будем условно называть основным. По отношению к нему другие динамические режимы могут отличаться величиной какого-либо одного параметра: V_0 ,

Δt , T , или одновременно несколькими. Для анализа динамики квантового волнового пакета проведены достаточно подробные исследования карты уровней плотности вероятности на плоскости (ζ, τ) , ее распределений по координате ζ в фиксированные моменты времени τ , временной зависимости средних значений координаты и скорости пакета, а также соотношения неопределенностей. Кроме того, исследована и показана независимость установившихся колебаний пакета и динамических средних от начальных условий, проведены расчеты фазовых траекторий, точечных отображений и устойчивости периодических колебаний.

Функция двух переменных $N = N(\zeta, \tau)$ может рассматриваться в трехмерном пространстве (ζ, τ, N) как уравнение поверхности, где N – высота, а ζ, τ – координаты точки в горизонтальной плоскости. Если построить сечения поверхности плоскостями $N = \text{const}$ и затем спроектировать полученные линии уровня на плоскость (ζ, τ) , то получим карту уровней плотности вероятности. Используя различные цвета, легко построить довольно подробную картину рельефа. Ниже проведены расчеты для параметров основного режима. На рис. 4, а более светлые тона соответствуют большим значениям N , а более темные – меньшим. Несмотря на упрощения, имеем вполне приемлемую картину динамических процессов.

Как видно из рис. 4, а, карта уровней плотности вероятности на временном интервале $(0, 60)$, содержащем около десяти периодов, соответствует переходному процессу. На этом интервале отклонения квантового волнового пакета от равновесного положения постепенно увеличиваются, пока не достигнут определенных значений, после чего картина колебаний сохраняется. В соответствии с эволюцией N происходят колебания средних величин $\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle$ во времени (рис. 4, б). Фурье-преобразование $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$, соответствующее временной реализации $\langle \zeta \rangle$, имеет вид, приведенный на рис. 4, в. На временном интервале $(0, 150)$ колебания имеют инкрементный участок, а затем в системе устанавливается режим колебаний с постоянной амплитудой. Такое поведение является характерным для аналогичных колебательных систем в классической механике. Фурье-преобразование $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ имеет резко выраженную отдельную фурье-компоненту $F_{\langle \zeta \rangle}(1)$. Ее форма имеет вид пика, который уширяется относительно $\Omega = 1$. Постоянная составляющая $F_{\langle \zeta \rangle}(0) \simeq 10^{-2} F_{\langle \zeta \rangle}(1)$, высшие гармоники $F_{\langle \zeta \rangle}(2), F_{\langle \zeta \rangle}(3)$ очень слабые. Следует отметить, что фурье-спектр сигнала, задаваемого формулой (3) для $\tau \in [0; 300]$, $T = 2\pi$, $\Delta t = \pi/16$, имеет множество высших гармоник, амплитуда которых очень медленно уменьшается с ростом номера гармоники. Однако, как видно из рис. 4, в, в частотном отклике все высшие гармоники $F_{\langle \zeta \rangle}(n)$ при $n > 4$ исчезают полностью. Для последующего анализа удобно ввести фазовое пространство $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle, \tau)$ и проекции фазовых траекторий на плоскость $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle)$. Ради упрощения вместо термина «проекция фазовой траектории» будем использовать термин «фазовая траектория на плоскости». Фазовая траектория на плоскости $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle)$ для параметров рассматриваемого основного динамического режима представлена на рис. 4, г, она исходит из начальной точки $\langle \zeta \rangle = 0, \langle V \rangle = 0$ на фазовой плоскости, раскручивается изнутри по спирали и навивается на предельную траекторию.

Для изучения свойств предельной траектории следует выполнить точечные преобразования, а также проверить теорему Кенигса [10, 11, 15] и показать устойчивость решений. Вначале изучим множество дискретных точек $X_n = (\langle \zeta \rangle_n, \langle V \rangle_n)$ на фазовой плоскости в моменты времени nT , $n=0, 1, 2, \dots$. На рис. 4, д дан после-

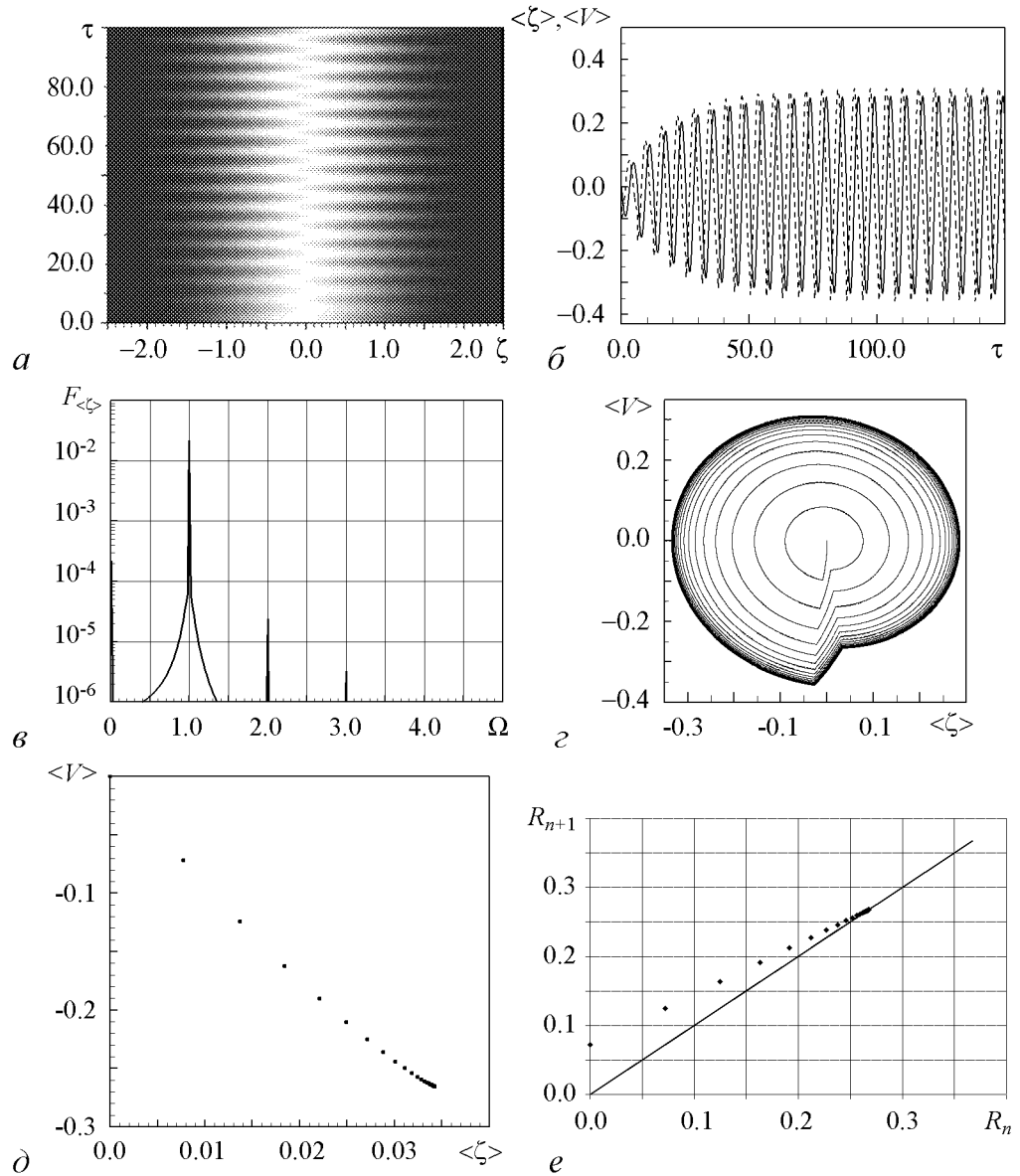


Рис. 4. Вынужденные колебания для параметров основного динамического режима: *a* – карта уровней плотности вероятности; *b* – эволюция динамических средних; *c* – фурье-преобразование временной зависимости $\langle \zeta \rangle$; в фурье-спектре присутствуют не только частота внешнего воздействия, но и её высшие гармоники; *d* – фазовые траектории на плоскости $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle)$; под действием первого импульса накачки фазовая точка смещается из исходного положения (начало координат), раскручивается по спирали, получает очередной импульс и т.д.; каждая очередная спираль удаляется от начала координат, пока не достигнет предельного положения (аттрактора); *e* – стробоскопическое отображение; точки X_n , соответствующие моментам времени $\tau_n = nT$, $n = 0, 1, \dots$, характеризуют постепенный переход к предельной точке и установившимся колебаниям; на графике расстояния между соседними точками уменьшаются, последовательность R_n стремится к предельной точке R_c ; в точке R_c модуль производной $|df/dR| = 0.73$, поэтому колебания устойчивы

довательный набор точек от заданной начальной $X_0 (\langle \xi \rangle_0, \langle V \rangle_0) = 0$ до некоторой конечной $X (0.034, 0.27)$. Расстояния между соседними точками постепенно уменьшаются, возникает область сгущения и переход к предельной точке. В дополнение можно также ввести определение расстояния на фазовой плоскости при помощи соотношения

$$R_n = \sqrt{\langle \xi \rangle_n^2 + \langle V \rangle_n^2}, \quad (13)$$

построить график зависимости $R_{n+1} = f(R_n)$ и определить неподвижную точку, соответствующую установившимся колебаниям. График этой зависимости представлен на рис. 4, *e*. Последовательность R_n стремится к неподвижной точке R_c . Модуль производной в этой точке, рассчитываемый как

$$\left. \frac{df}{dR} \right|_{R=R_c} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{R_{n+1} - R_n}{R_n - R_{n-1}}, \quad (14)$$

равен 0.73. В соответствии с теоремой Кенигса это означает существование устойчивого аттрактора. Прежде чем перейти к другим начальным условиям, обсудим структурные свойства квантового волнового пакета для параметров основного режима.

Координатная зависимость функции N в фиксированные моменты времени дает информацию о пространственном распределении плотности вероятности, которое определяет динамические свойства. При больших временах имеем динамический режим с установившимися колебаниями, типичная картина имеет вид, приведенный на рис. 5, *a*. Квантовый волновой пакет остается достаточно локализованным, его ширина на половинном уровне N составляет примерно 0.24 от размера ямы. С течением времени он смещается от исходного положения как целое (см. рис. 5, *a*). Для указанных фиксированных моментов времени координатная зависимость N изучалась при помощи расчетов фурье-преобразования $F_N(q)$ (рис. 5, *b*). График представляет монотонно спадающую зависимость от q (волнового числа для координатного фурье-преобразования). При изменении $F_N(q)$ от $2 \cdot 10^{-2}$ до 10^{-4} величина q увеличивается от 0 до 3.0, то есть $\Delta q \simeq 3.0$. Изменения положения пакета в пространстве,

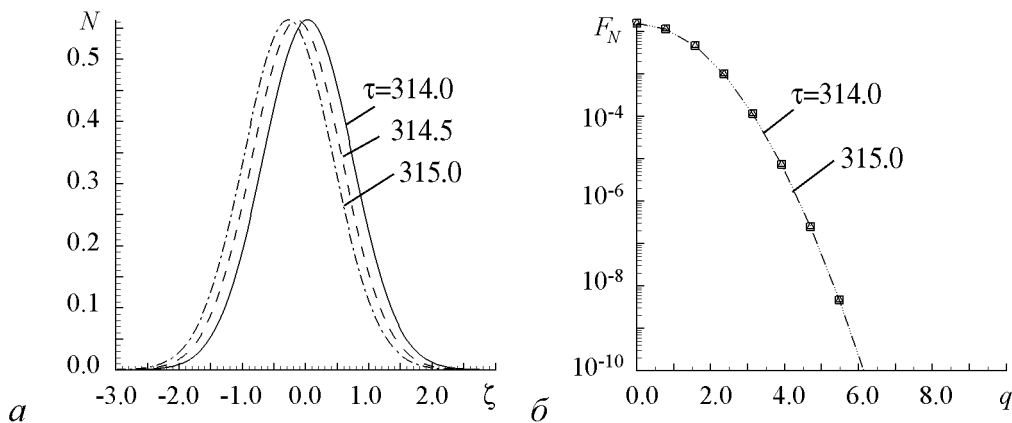


Рис. 5. Структурные свойства квантового волнового пакета: *a* – распределение плотности вероятности по координате в разные моменты времени; отметим неизменность формы квантового волнового пакета при колебаниях с трением; *b* – Фурье-преобразование координатного распределения

соответствующие разным моментам времени, не меняют вида функциональной зависимости $F_N(q)$ и спектра волновых чисел. Таким образом, для установившихся колебаний спектр волновых чисел и пространственная форма квантового волнового пакета сохраняются во времени.

Дополнительно были проведены расчеты стандартных отклонений σ_ζ , σ_V и соотношения неопределенностей как функции времени τ для основного режима движения. Функции σ_ζ , σ_V не зависят от времени, и их произведение $\sigma_\zeta\sigma_V$ сохраняет постоянное значение, равное 0.5. Это соответствует минимизированному квантовому волновому пакету. Площадь $S = 0.5 \int_0^{2\pi} R^2 d\varphi$, ограниченная предельной траекторией на фазовой плоскости, равна 0.3065006 и сохраняется с высокой степенью точности при изменении начальной скорости.

Динамические режимы, параметры которых отличаются от основного только тем, что начальные гауссовы пакеты обладают ненулевыми скоростями, были исследованы также достаточно подробно. Обозначая среднюю скорость на предельной траектории V_c , рассмотрим режимы движения при $|V_0| > |V_c|$ для $V_0 = -0.5, -2.0, -10.0$. Результаты численного моделирования для $V_0 = -0.5$ приведены на рис. 6. В отличие от основного режима на интервале $(0, 150)$, колебания $\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle$ имеют декрементный участок, а затем участок с постоянной амплитудой. По-прежнему, наиболее интенсивной является фурье-компонента $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ при $\Omega = 1$, нулевая и

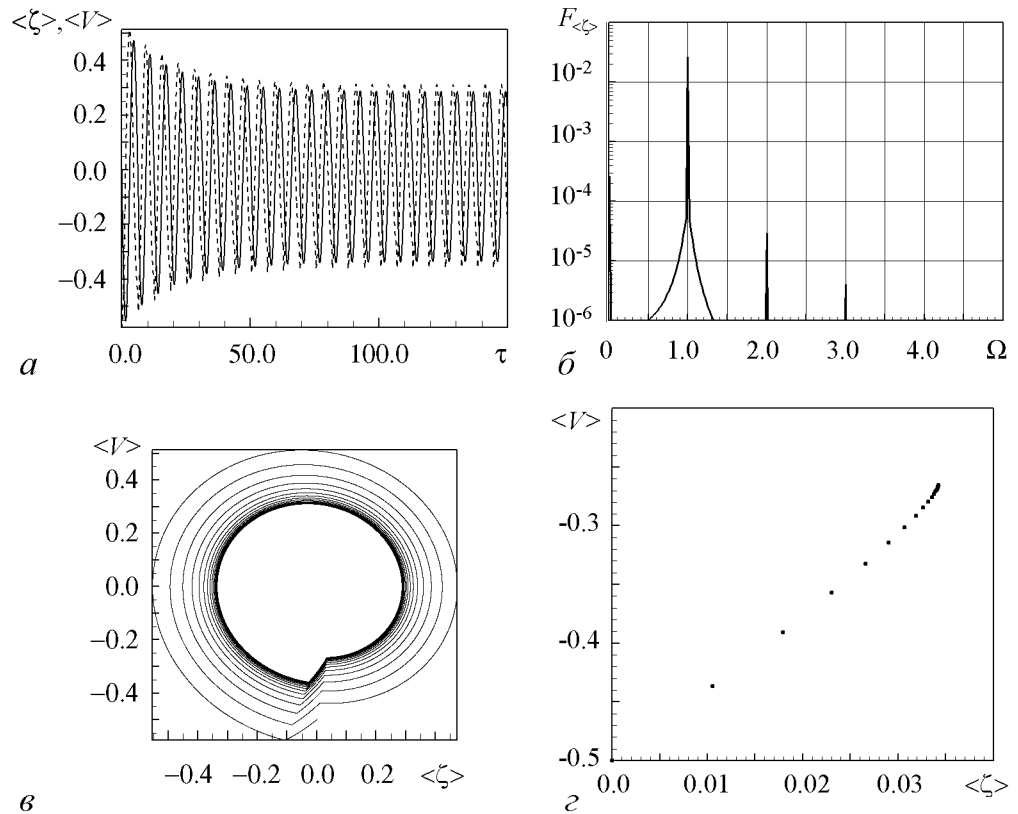


Рис. 6. Независимость установившихся колебаний от начальных условий: a – переходный участок и стационарный характер колебаний; b – фурье-преобразование временной зависимости $\langle \zeta \rangle$; c – переход к предельной фазовой траектории снаружи; d – стробоскопическое отображение

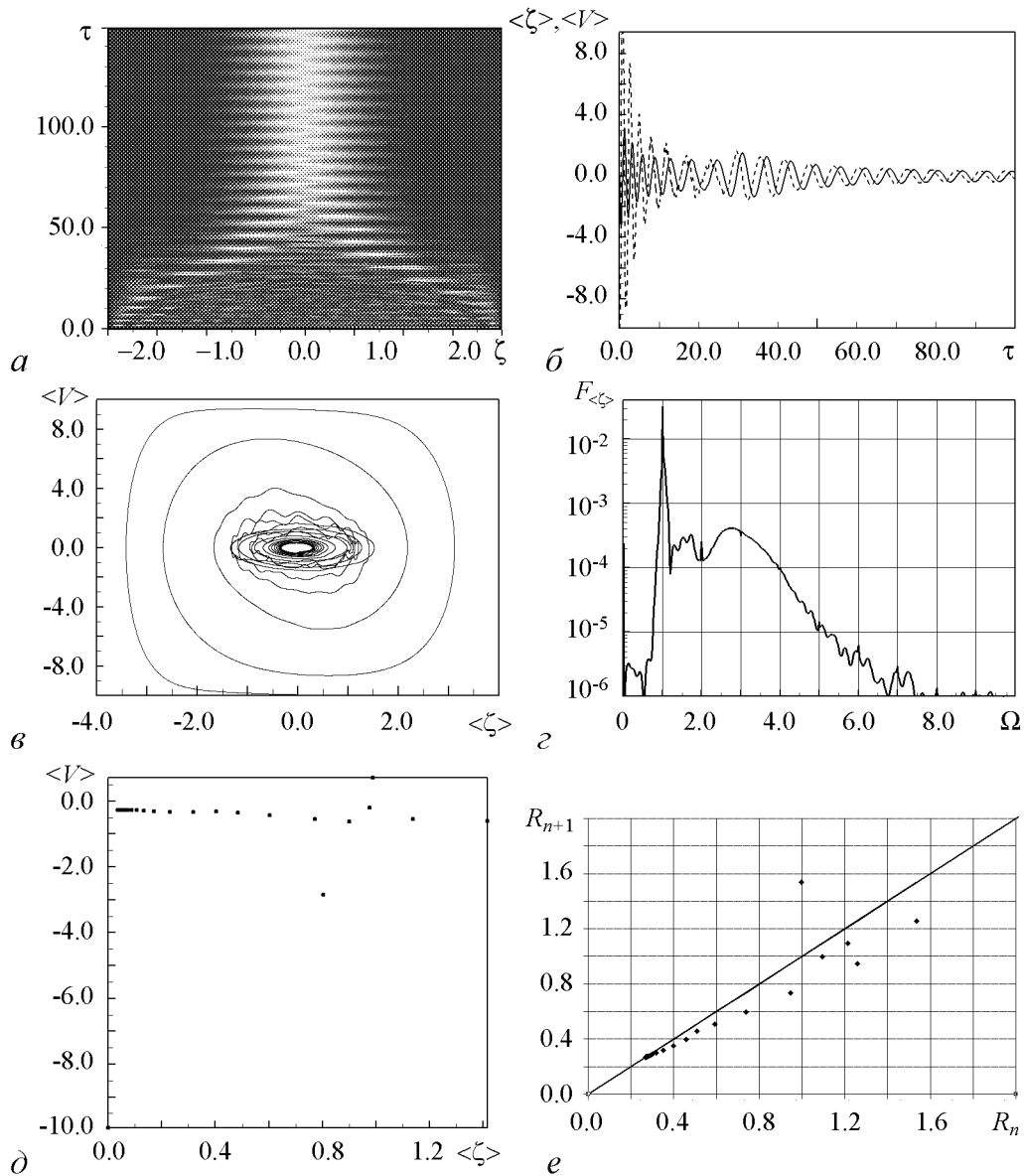


Рис. 7. Переход к предельной фазовой траектории при высокой начальной скорости гауссова пакета: *a* – карта уровней плотности вероятности; по сравнению с основным режимом (см. рис. 4, *a*) карта уровней характеризуется более сложным рельефом; *b* – временная эволюция динамических средних $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$; в переходной области можно отметить крупномасштабную модуляцию, а затем установление колебаний с постоянной амплитудой; *в* – переход к предельной фазовой траектории; с течением времени происходит уменьшение амплитуд $\langle \zeta \rangle$, $\langle V \rangle$, и траектория свертывается до предельной; *г* – частотный отклик; наряду с компонентами $F_{\langle \zeta \rangle}(1)$, $F_{\langle \zeta \rangle}(0)$ спектр частот имеет широкополосный участок, обусловленный влиянием стенок; *д* – стробоскопическое отображение; переходная область колебаний характеризуется заметным разбросом точек X_n ; с течением времени разброс и расстояние между соседними точками уменьшаются, возникает предельная точка; *е* – точечные отображения $R_{n+1} = f(R_n)$; с увеличением n расстояние между соседними точками уменьшается, и последовательность R_n стремится к R_c ; $|df/dR|$ в точке R_c , как и в основном режиме, равна 0.73 и характеризует устойчивость колебаний; несмотря на влияние стенок в переходной области, установившийся режим совпадает с основным

высшие гармоники возбуждаются слабо. Фазовая траектория начинается снаружи от предельной траектории, перемещается по спирали, испытывая малые скачки при воздействии импульсов накачки, пока не осядет на предельную траекторию (рис. 6, в). Предельная траектория практически совпадает с таковой для основного динамического режима (см. рис. 4, з). Это демонстрирует независимость от начального условия. Множество дискретных точек $X_n = (\langle \zeta \rangle_n, \langle V \rangle_n)$ в последовательные моменты времени nT , $n = 0, 1, 2, \dots$ сходится к предельной точке (рис. 6, з), которая характеризует устойчивые периодические колебания. Расчеты для $V_0 = -2.0$ также приводят к аналогичным выводам о независимости от начального условия и устойчивости колебаний. На плоскости $(\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle)$ фазовая точка стремится к предельной, что подтверждает установившийся характер колебаний. При достаточно высокой начальной скорости пакета $V_0 = -10.0$, карта уровней плотности вероятности характеризуется заметным фрагментарным распределением на временном интервале $(0, 50)$. Отдельные, более интенсивные фрагменты с течением времени удаляются от стенок системы, а внутренняя, более темная область постепенно исчезает (рис. 7, а). Колебания средних $\langle \zeta \rangle, \langle V \rangle$, обусловленные эволюцией квантового волнового пакета, имеют переходный участок; затем, при достаточно больших τ (расчеты проводились в интервале $(0, 300)$) амплитуда колебаний становится постоянной (рис. 7, б). Фазовая траектория закручивается и переходит к предельной (рис. 7, в). Площадь S , ограниченная предельной фазовой траекторией, равна 0.3065007 и практически такая же, как и для основного динамического режима. Предельная траектория имеет такую же конфигурацию, как и в основном режиме, когда фазовая траектория раскручивалась изнутри.

Фурье-спектр, выражающий частотный отклик для средней координаты, имеет наиболее интенсивную компоненту $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ на частоте $\Omega = 1$, то есть на частоте повторения импульсов $\Omega_{\text{ext}} = 1$ (рис. 7, з). Численные значения $F_{\langle \zeta \rangle}(1)$ для просчитанных динамических режимов близки друг другу. Стробоскопическое отображение и соответствующее ему точечное отображение $R_{n+1} = f(R_n)$ даны на рис. 7, д, е, при этом в неподвижной точке модуль производной $|df/dR| \approx 0.7$. Согласно теореме Кенигса это означает, что предельная траектория и колебания устойчивы.

Обсуждение результатов

В проведенных расчетах мы ограничились неизменной величиной управляющего параметра \tilde{F}_0 . Другие параметры, а именно: $\Delta\tau = \pi/16$, $k = 0.1$, $\Omega \simeq 1$, $\Omega_{\text{ext}} = 1$, были выбраны с целью получения колебательных решений, которые можно сравнивать с классическими аналогами. В качестве классического аналога можно рассматривать колебания осциллятора с линейным трением и внешней силой, задаваемой в виде периодической последовательности кратковременных импульсов. Анализ частотного спектра решений такой классической задачи показывает, что сильно возбуждается основная частота повторения импульсов, высшие гармоники являются слабыми, поэтому имеет место сходство с классическими результатами. Другими словами, в рамках квантового динамического описания, когда существенны квантовые волновые закономерности, реализуется классический механизм вынужденных колебаний. В рамках модели Шредингера – Ланжевена – Костина диссипативная си-

ла не проявляет своей деструктивной роли в разрушении квантовой когерентности. Колебания квантовых волновых пакетов, соответствующие предельной траектории на фазовой плоскости, характеризуются минимизированным соотношением неопределенностей.

Существенную роль в формировании установившихся колебаний играет основная частота повторения импульсов, определяемая как $\Omega_{\text{ext}} = 2\pi/T$. В спектрах частот, характеризующих отклик системы во всех режимах, она имеет доминирующее значение. Демпфированная частота собственных колебаний при слабой диссипации мало отличается от частоты осциллятора $\Omega = 1$. В основном динамическом режиме частота накачки Ω_{ext} , равная 1, близка к Ω_d . Варьируя периоды импульсов накачки, например, полагая $T_1 = 2\pi + \pi/16$, $T_2 = 2\pi - \pi/16$, в спектрах обнаруживаем опять доминирующую роль частот $\Omega_{\text{ext}} = 2\pi/T_1$, $\Omega_{\text{ext}} = 2\pi/T_2$, а собственная частота явно не обнаруживается. В динамических режимах, когда частота Ω_{ext} , соответствующая периоду импульсной накачки, заметно отличается от демпфированной частоты осциллятора Ω_d , также реализуется режим с установившимися колебаниями. Однако, фурье-преобразование временной зависимости $\langle \zeta \rangle$ показывает, что спектр частот усложняется, и роль собственных колебаний становится более существенной. Например, если динамический режим отличается от основного тем, что параметр $T = 3\pi$ или $\Omega_{\text{ext}} = 2/3$, частотный спектр функции $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ содержит основную частоту Ω_{ext} и ее высшие гармоники $n\Omega_{\text{ext}}$, $n = 2, 3, 4, 5, 6, 7$, а также частоту осциллятора Ω_d . Теперь пик $F_{\langle \zeta \rangle}(\Omega)$ на частоте Ω_d обнаруживается явно. Интенсивности спектральных пиков для Ω_{ext} и Ω_d практически одинаковы. Однако при указанном различии частот Ω_{ext} и Ω_d амплитуда установившихся колебаний почти в десять раз меньше, чем в основном динамическом режиме. Из сравнения результатов вычислений следует, что динамический режим при $\Omega_{\text{ext}} \simeq \Omega_d$ наиболее оптимальный, так как амплитуда колебаний наибольшая. Увеличение длительности импульса накачки приводит к возрастанию амплитуд колебаний $\langle \zeta \rangle_c, \langle V \rangle_c$. Расчеты динамических режимов были проведены при $\Delta t < 0.5T$ для разных V_0, T . Эти расчеты подтверждают качественные результаты и выводы, изложенные в предыдущем разделе.

Библиографический список

1. Ford G.W., Kac M., and Mazur P. Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators // J. Math. Phys. 1965. Vol. 6, № 4. P. 504.
2. Kostin M.D. On the Schrödinger-Langevin equation // J. Chem. Phys. 1972. Vol. 57(9). P. 3589.
3. Wagner Heinz-Jurgen. Schrödinger quantization and variational principles of dissipative quantum theory // Z. Phys. B. 1994. Vol. 95. P. 261.
4. Albrecht K. A new class of Schrödinger operators for quantized friction // Phys. Lett. 1975. Vol. 56B, № 2. P. 127.
5. Hasse R.W. On the quantum mechanical treatment of dissipative systems // J. Math. Phys. 1975. Vol. 16, № 10. P. 2005.

6. *Doebner H.-D., Goldin G.A.* Introducing nonlinear gauge transformation in a family of nonlinear Schrödinger equations // *Phys. Rev. A.* 1996. Vol. 54, № 5. P. 3764.
7. *Wysocki R.J.* Hydrodynamic quantization of mechanical systems // *Phys. Rev. A.* 2005. Vol. 72. P. 032113-1.
8. *Ván P., Fülöp T.* Stability of stationary solutions of the Schrödinger-Langevin equation // *Phys. Lett. A.* 2004. Vol. 323. P. 374.
9. *Санин А.Л.* Квантовый транспорт электрона в пространстве с однородным положительным зарядом и световой волной // *Оптика и спектроскопия.* 1994. Т. 77, № 5. С. 822.
10. *Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э.* Теория колебаний. М.: ГИФМЛ, 1959.
11. *Ланда П.С.* Автоколебания в системах с конечным числом степеней свободы. М.: Наука, 1980.
12. *Рабинович М.И., Трубецков Д.И.* Введение в теорию колебаний. М.: Наука, 1984.
13. *Мизгулин В.В., Медведев В.И., Мустель Е.Р., Парыгин В.Н.* Основы теории колебаний. М.: Наука, 1988.
14. *Ланда П.С.* Нелинейные колебания и волны. М.: Наука – Физматлит, 1997.
15. *Карлов Н.В., Кириченко Н.А.* Колебания, волны, структуры. М.: Физматлит, 2001.
16. *Эрроусмит Д., Плейс К.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. Качественная теория с приложениями. М.: Мир, 1986.
17. *Grindlay J.* On an application of a generalization of the discrete Fourier transform to short time series // *Can. J. Phys.* 2001. Vol. 79. P. 857.
18. *Mott N., Sneddon I.* Wave mechanics and its applications. Oxford and the Clarendon Press. 1948, 427 p.
19. *Багманов А.Т., Санин А.Л.* Квантовая динамика микрочастицы в одномерных системах // *Научно-технические ведомости СПбГТУ.* 2005. № 4. С. 7.
20. *Багманов А.Т., Санин А.Л.* Резонансы пространственно ограниченного квантового осциллятора // *Успехи современной радиоэлектроники.* 2005. № 12. С. 46.
21. *Ushveridze A.G.* Dissipative quantum mechanics. A special Doebner-Goldin equation, its properties and exact solutions // *Phys. Lett. A.* 1994. Vol. 185. P. 123.
22. *Ushveridze A.G.* The special Doebner-Goldin equation as a fundamental equation of dissipative quantum mechanics // *Phys. Lett. A.* 1994. Vol. 185. P. 128.
23. *Smirnovsky A.A., Sanin A.L.* Temporal resonances and structures in quantum systems under dissipation // *Proceedings of SPAS jointly with UWM. Tenth Intern. Workshop on NDTSC-2006. 5-8 July 2006. Univ. of Warmia and Mazury in Olsztyn. Olsztyn, Poland. 2006. Vol. 10. P. 43.*

*Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет*

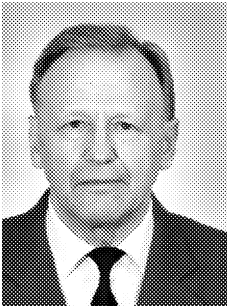
*Поступила в редакцию
После доработки*

*02.02.2007
10.05.2007*

DRIVEN OSCILLATIONS OF QUANTUM WAVE PACKETS IN SYSTEM WITH FRICTION, QUADRATIC POTENTIAL AND IMPENETRABLE WALLS

A.L. Sanin, A.A. Smirnovsky

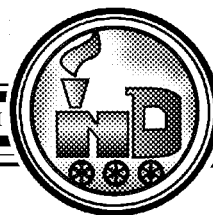
The quantum dissipative system with quadratic potential confined by infinite walls of well and subjected to impulse pump was investigated in detail. The numerical simulation was carried out in context of the Schrödinger-Langevin-Kostin equation. The propagation of quantum wave packets, calculations of phase trajectories and mappings, dynamical averages, frequency spectra have been performed and discussed. These data allow to state the existence of the stable oscillatory regimes and correspondence with classic analogous systems.



Санин Андрей Леонардович – родился в Ленинграде (1935). Окончил Ленинградский политехнический институт (1963), инженер-физик. Работает на кафедре «Теоретическая физика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (СПбГПУ), доктор физико-математических наук, профессор кафедры. Область научных интересов: качественный анализ и численное моделирование электронных волн, структур, квантовая динамика гамильтоновых и диссипативных систем, фундаментальное образование. По данной тематике имеет более 150 публикаций.



Смирновский Александр Андреевич – родился в Ленинграде (1982). Окончил СПбГПУ (2005), магистр по направлению «Прикладная математика и физика». В настоящее время аспирант кафедры «Теоретическая физика» СПбГПУ. Область научных интересов: квантовая механика, гидроаэродинамика, нелинейные и диссипативные системы, численные методы. Опубликовал около 20 работ, включая тезисы докладов.



ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИЖЕНИЙ СЕВЕРНОГО ПОЛЮСА ЗЕМЛИ С ПОМОЩЬЮ ОТОБРАЖЕНИЙ НА ПЕРИОДЕ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ

Н.Н. Иващенко, Н.С. Сидоренков, Д.М. Сонечкин

Из обработки астрономических наблюдений известно, что движения Северного полюса Земли состоят из тренда в направлении Гренландии и наложенной на этот тренд вращательной компоненты, в которой доминируют периоды в 12 месяцев, вызываемые сезонным перераспределением масс в атмосфере и гидросфере Земли, и периоды, примерно, в 14 месяцев, называемые чандлеровскими, природа которых не ясна. Из-за несоизмеримости этих периодов во временных рядах координат полюса видны примерно шести-семилетние биения. До сих пор не установлено с определенностью, каков характер этих биений. Цель настоящей работы – прояснить этот вопрос, используя ряд наиболее точных данных о координатах Северного полюса за период с 5 января 1962 года до 18 июля 2004 года (временная дискретность ряда – пять дней). Для этого использована математическая техника точечных отображений на секущих фазовых траекториях, построенных по годовому периоду внешней силы. Найдено, что частота биений меняется квазипериодическим образом, а их амплитуда зависит от сезонов года.

В 1765 году (более двухсот лет назад!) для описания вращения Земли как твердого тела Л. Эйлер [1] вывел систему трех квадратично-нелинейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} A\dot{\omega}_1 &= (B - C)\omega_2\omega_3, & B\dot{\omega}_2 &= (C - A)\omega_1\omega_3, \\ C\dot{\omega}_3 &= (A - B)\omega_1\omega_2, & C > B > A > 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где A, B, C и ω_i ($i = 1, 2, 3$) – компоненты момента инерции и вектора мгновенной угловой скорости Земли, соответственно.

Принимая во внимание, что экваториальное сечение фигуры Земли почти не отличается от окружности, а именно: $\varepsilon = (B - A)/C \approx 10^{-5}$, Эйлер предположил, что (1) можно редуцировать к уравнению линейного осциллятора

$$\ddot{\omega}_i = -\Omega^2\omega_i, \quad i = 1, 2, \quad (2)$$

если положить $\varepsilon = 0$, то есть $B = A$. При этом частота $\Omega = (C - A)\omega_3/A$ дает период свободной нутации Земли (периодических отклонений мгновенных координат полюсов от их среднего положения) в приблизительно десять месяцев.