

О БРОУНОВСКОМ ДВИЖЕНИИ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

В.И.Мельников, С.В.Мешков

Построена квантовая теория взаимодействия частицы, движущейся в одномерном потенциале, с термостатом типа вязкой среды. Найдено равновесное распределение плотности и время жизни частицы в потенциальной яме конечной глубины при наличии туннелирования и диссипации.

Одномерное движение классической частицы массой m в потенциале $U(x)$ при наличии вязкой среды может быть описано уравнением Ланжевена $\dot{x} = -\gamma\dot{x} - m^{-1}U'(x) + \eta(t)$, где $\eta(t)$ – случайная сила, γ – коэффициент трения, являющийся единственной характеристикой взаимодействия с термостатом.

Для рассмотрения квантовой ситуации мы явно введем термостат в виде полубесконечной струны, прикрепленной к частице и натянутой перпендикулярно оси ее движения. В классическом пределе действие струны на частицу эквивалентно наличию вязкой среды с коэффициентом трения $\gamma = \rho s/m$, где ρ – линейная плотность струны, s – скорость бегущих волн на струне¹; в квантовом случае также будет фигурировать только эта комбинация ρ и s . Тем самым число степеней свободы увеличивается, но зато мы получаем бездиссипативную динамическую систему, которую можно проквантовать обычным образом. Отметим, что излагаемый подход применим к любой среде с линейным откликом.

Прежде всего найдем равновесное распределение квантовых броуновских частиц по координате в потенциале $U(x)$ при температуре $T \equiv \beta^{-1}$. Состояние системы частица + струна полностью определяется смещением струны вдоль оси движения частицы $x(z)$ (z – расстояние вдоль струны, координата частицы $x \equiv x(0)$). Равновесное распределение частиц по координате $N(x)$ дается фейнмановским интегралом по периодическим траекториям $x(z, t)$ с мнимым временем

$$N(x) = \int \exp(-S/\hbar) D[x(z, t)], \quad (1)$$

$$x(z, \hbar\beta) = x(z, 0), \quad x(0, 0) = x(0, \hbar\beta) = x$$

с действием

$$S = \int_0^{\hbar\beta} \frac{1}{2} \left\{ m\dot{x}^2(0) + 2U(x(0)) + \int_0^{\infty} [\rho\dot{x}^2(z) + \rho s^2 \left(\frac{\partial x(z)}{\partial z}\right)^2] dz \right\} dt. \quad (2)$$

Предполагая малость температуры по сравнению с характерным перепадом потенциала, при вычислении интеграла (1) можно считать потенциал U квадратичным вблизи точки x , т.е. удерживать в тэйлоровском разложении потенциала вблизи этой точки члены не выше второго порядка. (В случае гармонического осциллятора получаемое ниже выражение для $N(x)$ является точным). Разлагая координату частицы в ряд Фурье по мацубаровским частотам

$$x(0, t) = x + a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos \omega_n t + b_n \sin \omega_n t), \quad \omega_n \equiv 2\pi n/\beta\hbar$$

и минимизируя действие (2) по конфигурациям струны, получим

$$S = \beta\hbar \left\{ U(x) + U'(x)a_0 + \frac{m}{2} \left[m^{-1} U''(x) a_0^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\omega_n^2 + \gamma\omega_n + m^{-1} U''(x)) (a_n^2 + b_n^2) \right] \right\}.$$

Подставляя это выражение в (1) и интегрируя по a_n, b_n при условии $\sum_{n=0}^{\infty} a_n = 0$, найдем с точностью до множителя, не зависящего от координаты,

$$N(x) = \phi^{1/2}(x) \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^+(x) / 2\pi) \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^-(x) / 2\pi) \cdot \exp \{ -\beta [U(x) - (1 - \phi(x)) (U'(x))^2 / 2U''(x)] \}, \quad (3)$$

где

$$\phi(x) \equiv [m^{-1} U''(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\omega_n^2 + \gamma |\omega_n| + m^{-1} U''(x))^{-1}]^{-1}, \quad (4)$$

λ^+ и λ^- — корни уравнения ¹⁾

$$\lambda^2 + \gamma \lambda + m^{-1} U''(x) = 0. \quad (5)$$

Выражение (3) применимо в тех областях x , где $U''(x)$ превышает некоторое (отрицательное) граничное значение $U''_{\text{гр}}$, отвечающее самому правому полюсу ϕ как функции U'' . При подходе к области, где $U'' \leq U''_{\text{гр}}$, $N(x)$ определяется траекториями, все более удаляющимися от x , так что в конце концов квадратичное приближение становится неприменимым. При $\gamma = 0$ имеем

$$\phi(x) = [\beta \hbar (U''(x)/m)^{1/2} / 2]^{-1} \text{th}(\beta \hbar (U''(x)/m)^{1/2} / 2) \text{ и } U''_{\text{гр}} = -m (\pi / \beta \hbar)^2$$

Рассмотрим теперь задачу о выходе броуновских частиц из одномерной потенциальной ямы через барьер. Полагая, что глубина ямы $U_0 \gg T$, воспользуемся квазистационарным приближением, т.е. будем считать распределение частиц в яме равновесным, а поток через барьер — установившимся. Классическая задача в такой постановке была решена Крамерсом ², в квантовом случае для частиц, невзаимодействующих с термостатом, решение получено Аффлекком ³. С экспоненциальной точностью квантовое туннелирование рассматривалось И.Лифшицем и Каганом ⁴ (при конечной температуре без диссипации), Калдейрой и Легетом ⁵ (с диссипацией при нулевой температуре), Ларкиным и Овчинниковым ⁶ (с диссипацией при конечной температуре).

В соответствии с малостью потока распределение частиц отличается от равновесного лишь в привершинной области, где барьер можно считать квадратичным $U(x) = -m\omega^2 x^2 / 2$, ω — частота соответствующего перевернутого осциллятора. Запишем сначала отвечающую установившемуся потоку вигнеровскую функцию распределения частиц по координате x и импульсу p (см., например, ⁷) при $\gamma = 0$. Равновесная функция распределения для квантового перевернутого осциллятора отличается от классической заменой температуры T на $(\hbar\omega / 2) \text{ctg}(\hbar\omega / 2T)$. Установившемуся потоку через барьер (слева направо) отвечает функция распределения

$$f(p, x) = \text{const } \theta(p - m\omega x) \exp[-(\lambda / \hbar\omega) \text{tg}(\beta \hbar\omega / 2) (p^2 / 2m - m\omega^2 x^2 / 2)]. \quad (6)$$

Нетрудно проверить, что эта функция стационарна, переходит при $x \rightarrow -\infty$ в равновесную, а при $x \rightarrow +\infty$ плотность числа частиц $\int f(p, x) dp$ стремится к нулю.

Для нахождения $f(p, x)$ при $\gamma \neq 0$ перейдем к нормальным колебаниям системы частица + струна. При этом, помимо устойчивых мод осцилляторного типа, обнаруживается одна

¹⁾ Обратим внимание, что вязкость не влияет на равновесное распределение лишь в классическом пределе.

неустойчивая — перевернутый осциллятор с частотой λ^+ , являющейся положительным корнем уравнения (5) в точке $x = 0$. Очевидно, что при установившемся потоке функция распределения по координате и импульсу каждой из устойчивых мод будет равновесной, а для неустойчивой моды будет иметь вид (6) с λ^+ вместо ω . Находя посредством интегрирования по координатам и импульсам всех мод функцию распределения частицы и вычисляя поток через барьер $J = m^{-1} \int p f(p, x) dp$, найдем

$$J = \lambda^+ (2 \pi \beta m \omega^2 \phi(0))^{-1/2} N(0), \quad (7)$$

где $N(0)$ — равновесная плотность частиц на вершине барьера. Соотношение (7) отличается от классического лишь множителем $\phi^{-1/2}(0)$.

Обычно представляет интерес время жизни частицы в яме, т.е. отношение числа частиц в яме (в области $x < 0$) к потоку (7). При $T \ll U_0$ частицы сосредоточены вблизи дна ямы, где ее можно считать осциллятором с частотой Ω . Вычисляя в этом приближении число частиц в яме согласно (3), найдем окончательно

$$\tau^{-1} = \frac{\lambda^+ \Omega \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^+ / 2\pi) \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^- / 2\pi)}{2 \pi \omega \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^+ / 2\pi) \Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^- / 2\pi)} e^{-\beta U_0}, \quad (8)$$

где

$$\lambda^\pm = -\gamma/2 \pm (\gamma^2/4 + \omega^2)^{1/2}, \quad \Lambda^\pm = -\gamma/2 \pm (\gamma^2/4 - \Omega^2)^{1/2}.$$

Поскольку выражение (8) не содержит $\phi(0)$, при понижении температуры особенность в τ^{-1} возникает только в момент обращения $\Gamma(1 - \beta \hbar \lambda^+ / 2\pi)$ в бесконечность, так что область применимости (8) $T > T_c = \hbar \lambda^+ / 2\pi$ шире, чем выражений (3) и (7). При температурах, близких к T_c и ниже, для вычисления потока необходимо учитывать отклонение формы барьера от параболической (см. также ^{3, 4, 6}).

При высоких температурах полученное для τ^{-1} выражение переходит в крамеровское ² (все Γ — функции равны единице), а в пределе $\gamma \ll \omega, \Omega$ (с учетом соотношения $\Gamma(1+z)\Gamma(1-z) = \pi z / \sin \pi z$) дает результат Аффлека ^{1) 3}. Таким образом, полученный результат является прямым обобщением ² и ³ на случай наличия и квантовых эффектов и вязкости.

Литература

1. Schmid A. J. of Low Temp. Phys., 1982, 49, 609.
2. Kramers H.A. Physica 1940, 7, 284.
3. Affleck I. Phys. Rev. Lett., 1981, 46, 388.
4. Лифшиц И.М., Каган Ю. ЖЭТФ, 1972, 62, 385.
5. Caldeira A.O., Leggett A.J. Phys. Rev. Lett., 1981, 46, 211.
6. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, 322.
7. Татарский В.И. УФН, 1983, 139, 587.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау Академии наук СССР
Институт физики твердого тела
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
16 июня 1983 г.

1) Строго ради отметим, что при слишком малой вязкости, когда $\gamma/\Omega \ll T/U_0$, квазистационарное приближение неприменимо ².