УДК 517.598

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА В АСИММЕТРИЧНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Д. В. Солдатов

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

E-mail: alex@chebotar.phys.msu.su

Рассматривается новый численный метод решения задачи Коши для уравнения Шрёдингера с периодическим асимметричным потенциалом, на который наложено постоянное внешнее электрическое поле. Решение задачи Коши используется для вычисления зависимости среднего значения импульса электрона в зависимости от времени, начальных условий и величины внешнего поля. При заданном начальном состоянии среднее значение импульса характеризует средний ток и проводимость асимметричной периодической структуры, называемой ратчет-потенциалом.

Введение

Область исследования движения частиц в пространственно-периодических асимметричных системах (так называемых ратчетах) привлекла внимание исследователей более десяти лет назад в связи с интересными свойствами подобных систем. Изначально механизм ратчет-систем был применен для объяснения процесса переноса некоторых веществ в живых клетках (теория «молекулярных моторов»), впоследствии было предложено несколько вариантов технологического применения этого механизма [1].

Теоретическое исследование вопроса осложнялось отсутствием достаточно надежного численного алгоритма для решения задачи даже в случае достаточно простых моделей. В настоящей работе для исследования квантовой ратчет-системы будет применен численный метод Монте-Карло [2–4], который позволяет не только отказаться от построения сеток, но к тому же допускает простую оценку погрешности численного эксперимента. Задача, поставленная в настоящей работе, состоит в изучении движения электрона в потенциале вида

$$V(x) = eEx + V_0 \sum_{k=1}^{K} \frac{\sin(kx)}{k}, \qquad (1)$$

где линейная часть отвечает за воздействие внешнего электрического поля, а суперпозиция гармоник создает асимметричный периодический ратчет-потенциал. Фурье-образ этого потенциала представляет собой суперпозицию $2K$ функций Дирака в точках $\{\pm k\}_1^K$, поэтому метод Монте-Карло можно свести к моделированию однородного пуассоновского процесса, который совершает случайное блуждание с шагами из множества $\{\pm k\}_1^K$. Линейная часть потенциала учитывается за счет использования представления взаимодействия.

Уравнение Шрёдингера в представлении взаимодействия

Перейдем к рассмотрению задачи Коши для уравнения Шрёдингера с потенциалом $v(y)$ вида (1):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - f_\omega(\tau) x + v\left(\frac{y}{a}\right) \right) \Psi, \qquad (2)$$

$$\Psi(y, 0) = \Psi_0(y), \quad v(y) = V_0 \sum_{k=1}^{K} \frac{\sin(k\frac{2\pi y}{L})}{k},$$

где $L = 2\pi a$, а сила $f_\omega(\tau) = eE_\omega(\tau)$ равна произведению заряда электрона на напряженность электрического поля, состоящего из постоянного внешнего поля и случайной составляющей, которая соответствует взаимодействию электронов проводимости со средой (ω — случайный параметр).

Введем новые безразмерные переменные $t = \frac{\hbar}{ma^2}\tau$, $x = \frac{y}{a}$ и проведем следующие замены:

$$\tau \to t, \quad y \to x,$$

$$\Psi(y, \tau) \to \psi(x, t), \quad v(y) \to V(x) = \frac{ma^2}{\hbar^2} v(ax),$$

$$f_\omega(\tau) \to F_\omega(t) = \frac{ma^3}{\hbar^2} f_\omega \left(\frac{ma^2}{\hbar} \tau \right).$$

В результате уравнение (2) приобретает следующий вид:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(\widehat{H}_0 + V(x) \right) \psi(x, t), \qquad (3)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) = \Psi_0(ax), \quad \widehat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - F_\omega(t) x.$$

Функция $V(x)$ может быть представлена в виде Фурье-образа комплексной меры Радона, имеющей конечную вариацию [2]:

$$V(x) = \varkappa \int_{\mathbb{R}} \mu(dq)\, e^{-iqx + i\alpha(q)} =$$

$$= V_0 \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{2k} \int\limits_{\mathbb{R}} dq\, e^{-iqx} \left(e^{i\frac{\pi}{2}} \delta(q-k) + e^{-i\frac{\pi}{2}} \delta(q+k) \right),$$

где $\varkappa = V_0 \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{k}$. Перейдем в импульсное представление, используя преобразование Фурье $\mathcal{F}_{x\to p}\varphi(x) = \widetilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx}\varphi(x)\,dx$. Обозначим через $U_{0,t}$ унитарный коцикл $U_{0,t} = \overrightarrow{e}^{\,i\int_0^t \widehat{H}_0(s)\,ds}$, записанный в виде хронологической экспоненты, так что $\frac{d}{dt}U_{0,t} = iU_{0,t}\widehat{H}_0(t)$. Он обладает следующими коммутационными свойствами:

$$\widehat{p}_t = U_{0,t}\widehat{p}\,U_{0,t}^* = \widehat{p} + P_\omega(t), \quad P_\omega(t) = \int\limits_0^t F_\omega(s)\,ds,$$

$$\widehat{x}_t = U_{0,t}\widehat{x}\,U_{0,t}^* = \widehat{x} + \widehat{p}\,t + X_\omega(t), \quad X_\omega(t) = \int\limits_0^t P_\omega(s)\,ds.$$

Используя формулу Бейкера–Хаусдорфа, получим следующее выражение для оператора $\widehat{V}_t$ в импульсном представлении:

$$\widehat{V}_t = U_{0,t}\,V(\widehat{x})\,U_{0,t}^* = \varkappa \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq) e^{-iq\widehat{x}_t + i\alpha(q)} =$$

$$= \varkappa \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq) e^{i\left(-(1/2)q^2 t - qX_\omega(t) + \alpha(q) - qpt\right)} e^{q(\partial/\partial p)}.$$

Отметим, что если $\psi(x,t)$ — решение уравнения (3), то уравнение Шрёдингера для функции $\widetilde{\varphi}(p,t) = e^{-\varkappa t}\mathcal{F}_{x\to p}U_{0,t}\psi(x,t)$ можно записать в виде математического ожидания от суперпозиции экспонент стохастического действия S:

$$\frac{\partial \widetilde{\varphi}(p,t)}{\partial t} = \left(\frac{1}{i}\widehat{V}_t - \varkappa \right) \widetilde{\varphi}(p,t) =$$

$$= \varkappa \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq) \left(e^{iS(p,q,t)} \widetilde{\varphi}(p+q,t) - \widetilde{\varphi}(p,t) \right), \quad (4)$$

$$S(p,q,t) = -\frac{1}{2}q^2 t - qX_\omega(t) + \alpha(q) - \frac{\pi}{2} - qpt, \quad (5)$$

$$\widetilde{\varphi}(p,0) = \widetilde{\psi_0}(p).$$

Это уравнение в силу принципа Дюамеля эквивалентно интегральному уравнению

$$\widetilde{\varphi}(p,t) = e^{-\varkappa t}\widetilde{\psi_0}(p) + \varkappa \int\limits_0^t d\tau e^{-(t-\tau)\varkappa} \times$$

$$\times \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq) \widetilde{\varphi}(p+q,\tau) e^{iS(p,q,\tau)},$$

решение которого может быть записано в виде абсолютно сходящегося ряда

$$\widetilde{\varphi}(p,t) = e^{-\varkappa t} \Bigg\{ \widetilde{\psi}_0(p) + \sum_{n=1}^{\infty} \varkappa^n \int\limits_0^t \ldots \int\limits_0^{t_{n-1}} dt_1 \ldots dt_n \times$$

$$\times \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq_1) \ldots \int\limits_{\mathbb{R}} \mu(dq_n) \widetilde{\psi}_0 \left(p + \sum_{k=1}^{n} q_k \right) \times$$

$$\times \exp \left(i \sum_{k=1}^{n} S\left(p + \sum_{j=0}^{k-1} q_j, q_k, t_k \right) \right) \Bigg\}. \quad (6)$$

Численная реализация метода Монте-Карло

Для реализации численного метода Монте-Карло нам понадобится рассмотреть марковский скачкообразный процесс, который начинается в точке $p(t) = 0$ в момент времени $t = \tau$ и двигается в обратном по времени направлении вплоть до момента $\tau = 0$ (рис. 1). Пусть $p_n = p(t_n) = \sum_{j=0}^{n} q_j$ — текущее значение импульса траектории, которая совершила n скачков, q_j — величина j-го скачка, $t_n = t - \sum_{j=0}^{n} \tau_j$ — момент n-го скачка, τ_j — случайное время ожидания j-го скачка,

$$\mathbb{P}\{q_j = \pm n\} = \frac{1}{2}\frac{n^{-1}}{\sum_1^K k^{-1}}, \quad \mathbb{P}\{\tau_j > T\} = e^{-\varkappa T},$$

$$\varkappa = V_0 \sum_{k=1}^{K} k^{-1}$$

для любого j. Рассматриваемый скачкообразный процесс является однородным как в пространстве импульсов, так и по переменной времени. Можно показать, что сумма ряда (6) может быть эквивалентным образом представлена как математическое ожидание функционала, заданного на траекториях однородного пуассоновского процесса [2–5]:

$$\widetilde{\varphi}(p,t) = \mathbb{M}_t \widetilde{\psi}_0(p + p_N) \exp \left(i \sum_{n=0}^{N} S(p + p_{n-1}, q_n, t_n) \right),$$

где $N = N(t)$ — случайное число скачков вдоль траектории $p(\tau)$. Изменение импульса Δp_t, обуслов-

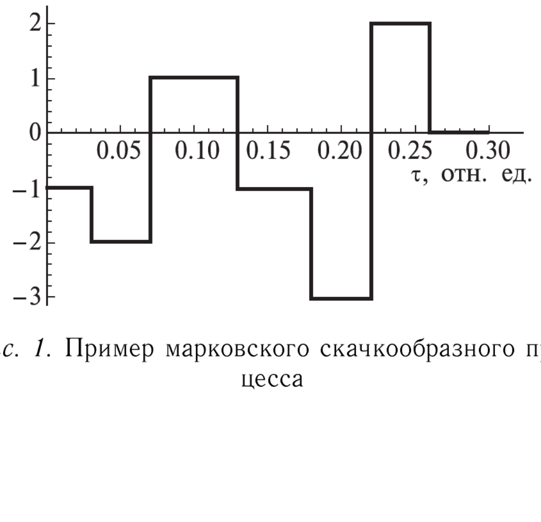

Рис. 1. Пример марковского скачкообразного процесса

ленное квантовым взаимодействием с ратчет-потенциалом, можно представить в виде

$$\Delta p_t = e^{2\varkappa t} \int\limits_{\mathbb{R}} \widetilde{\varphi}^*(p,t)\widehat{p}\widetilde{\varphi}(p,t)\,dp.$$

Для упрощения алгоритмизации метода Монте-Карло решение задачи Коши для уравнения (4) удобно представить в виде

$$\widetilde{\varphi}(p,t) = \mathbb{M}_t e^{iA-iBp}\widetilde{\psi}_0(p+C),$$

$$A = -\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{2}q_k^2 t_k + q_k X_\omega(t_k) - \alpha(q_k) + \frac{\pi}{2} + q_k t_k \sum_{j=1}^{k-1} q_j\right),$$

$$B = \sum_{k=1}^{N} q_k t_k, \quad C = \sum_{k=1}^{N} q_k.$$

Из принципа двойной рандомизации вытекает следующее выражение для Δp_t:

$$\Delta p_t = e^{2\varkappa t}\,\mathbb{M}_t e^{i(A_1-A_2)} R(B_1-B_2, C_1, C_2),$$

$$R(B, C_1, C_2) = \int\limits_{\mathbb{R}} p\, e^{-iBp}\widetilde{\varphi}_0^*(p+C_2)\widetilde{\varphi}_0(p+C_1)\,dp,$$

где случайные величины (функционалы случайных траекторий) A_1, B_1, C_1 и A_2, B_2, C_2 соответствуют двум независимым траекториям описанного выше скачкообразного марковского процесса.

В случае гауссова начального условия

$$\widetilde{\varphi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma}} \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma} - ix_0 p\right\}$$

функция $R(B, C_1, C_2)$ вычисляется явно:

$$R(B, C_1, C_2) = -\frac{1}{2} e^{\Phi(B,C_1,C_2)}\,(C_1 + C_2 - 2p_0 + 2iB\sigma)\,,$$

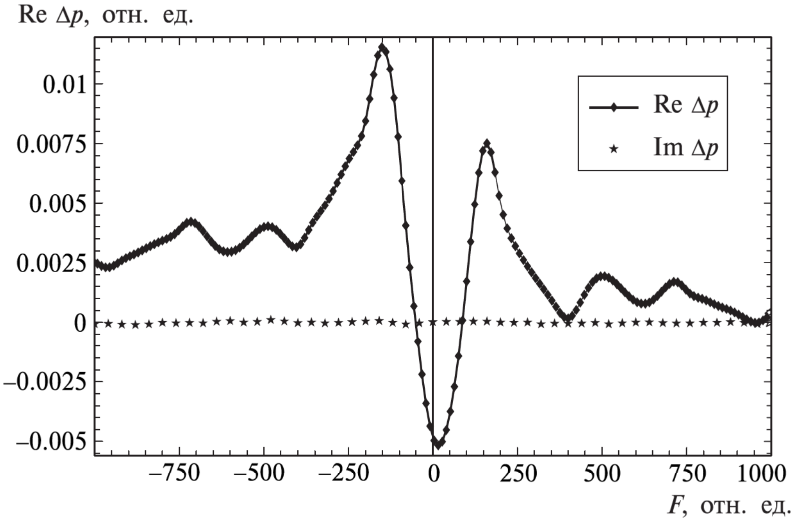

Рис. 2. Характерный вид зависимости $\Delta p(F)$ при $x_0 = 0$

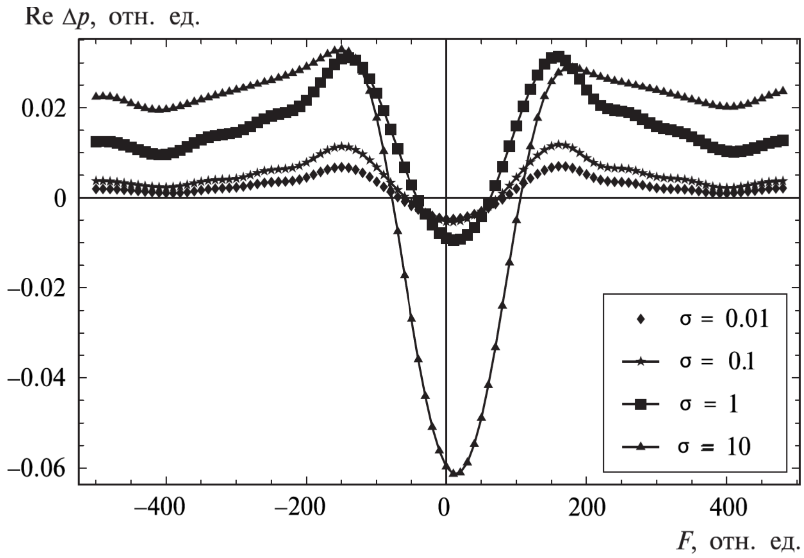

Рис. 3. Зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F)$ для различных значений σ при $x_0 = 0$

где

$$\Phi(B, C_1, C_2) = -\frac{1}{8\sigma}\big(4B^2\sigma^2 + 4iB\sigma\,(C_1 + C_2 - 2p_0) + \\ + (C_1 - C_2)\,(C_1 - C_2 + 8ix_0\sigma)\big).$$

Можно показать, что математическое ожидание для Δp_t сходится со скоростью, пропорциональной $e^{\varkappa t}/\sqrt{N}$, а для вычислительных целей в качестве грубой оценки погрешности можно использовать мнимую часть выборочного среднего значения импульса, которая в пределе при $N \to \infty$ стремится к нулю.

Результаты численного эксперимента

В качестве модели ратчет-потенциала в численном эксперименте использовалась функция $V(x) = V_0 \sum_{k=1}^{8} \frac{\sin(kx)}{k}$. Для оценок средних значений импульса электронов, взаимодействующих с ратчет-потенциалом, использовалось до $N = 10^9$ пар случайных траекторий. Во всех численных экспериментах величина $F_\omega(t)$ принималась за константу F.

Основные свойства решения задачи Коши для уравнения Шрёдингера, которые можно наблюдать, изучая численные аппроксимации решения, представлены в графической форме. Во-первых, стоит отметить, что зависимость величины среднего импульса Δp_t (или — с точностью до множителя — величины среднего тока ΔI_t) от внешнего поля является немонотонной и представляет собой набор максимумов, амплитуда которых убывает с ростом внешнего поля. На рис. 2–7 четко просматривается асимметрия указанной зависимости от направления внешнего поля и отличие от нуля величины среднего импульса при отсутствии поля. Помимо этого, на графике 2 изображена мнимая часть величины импульса $\mathrm{Im}\,\Delta p$, дающая представле-

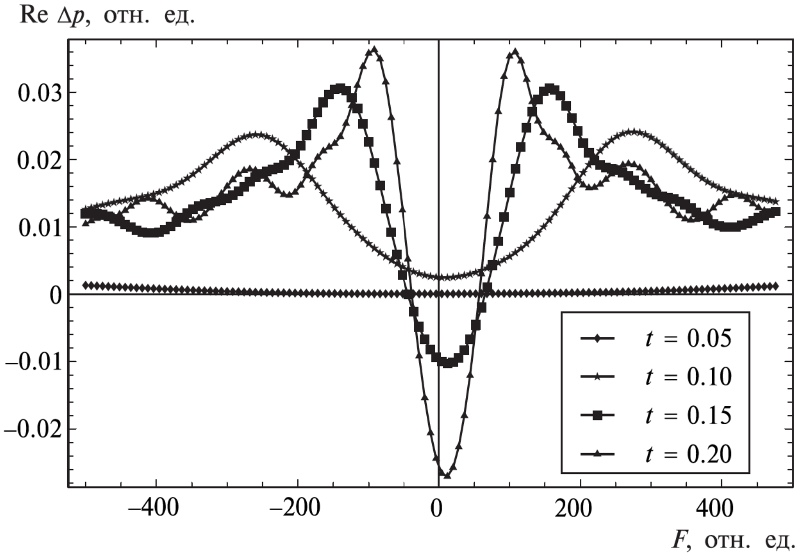

Рис. 4. Зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F)$ для различных значений t при $x_0 = 0$

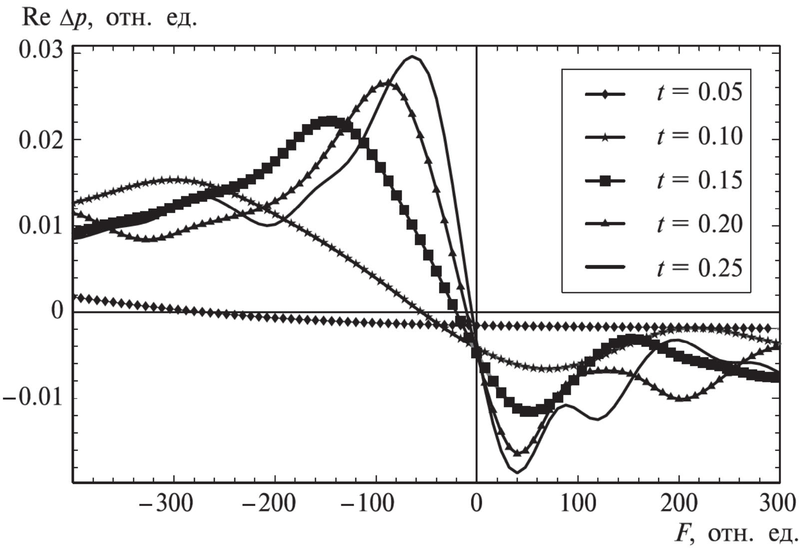

Рис. 5. Зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F)$ для различных значений t при $x_0 = 1$

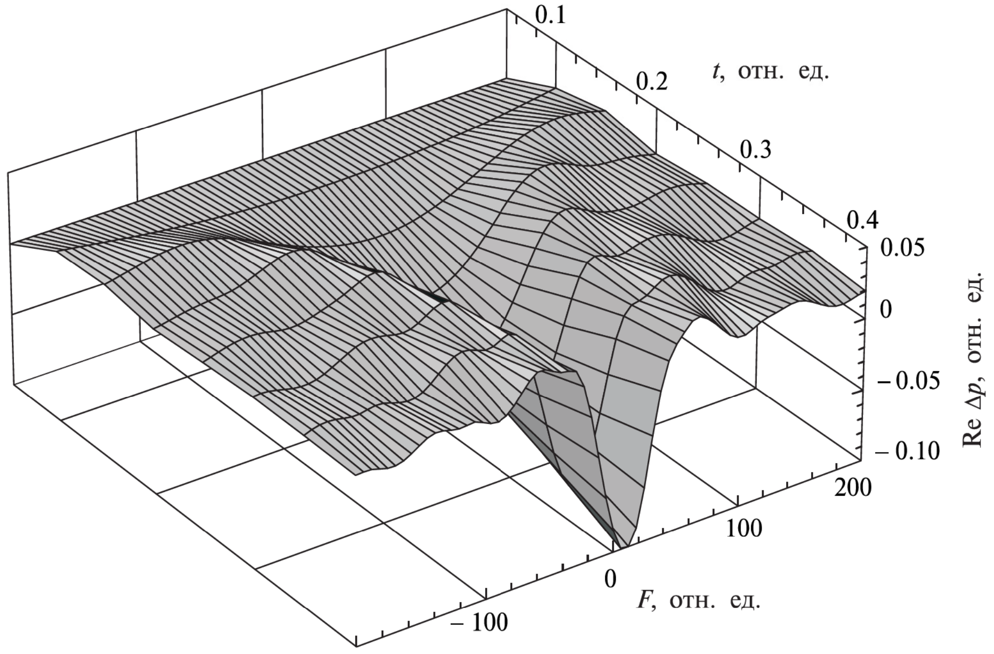

Рис. 6. Зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F,t)$ при $x_0=0$

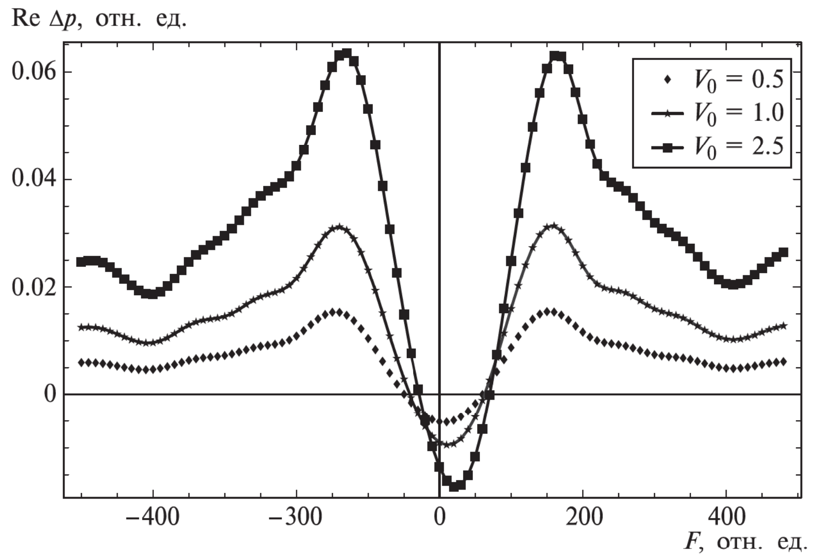

Рис. 7. Зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F)$ для различных значений V_0 при $x_0=0$

ние о величине погрешности численного эксперимента.

На рис. 3 изображена зависимость среднего импульса от величины приложенного внешнего поля при различных значениях ширины волнового пакета σ. Этот график иллюстрирует эффект увеличения вклада ратчет-потенциала в величину среднего тока при сужении пакета в координатном представлении.

Графики на рис. 4–6 дают представление о характере зависимости среднего тока от времени и величины внешнего поля при различных начальных положениях волнового пакета x_0. Видно, что максимум тока растет с увеличением времени и достигается при меньших значениях внешнего поля.

На рис. 7 приведена зависимость $\mathrm{Re}\,\Delta p(F)$ для различных значений амплитуды ратчет-протенциала, которая иллюстрирует, что с возрастанием амплитуды V_0 наблюдается монотонный рост тока.

Заключение

В итоге отметим, что в настоящей работе мы рассматриваем лишь математические аспекты метода решения задачи Коши для уравнения Шрёдингера с периодическим асимметричным потенциалом. Вопросы о согласованности теории «броуновских моторов» со вторым началом термодинамики выходят за рамки нашей работы. В частности, мы не обсуждаем оценок затрат энергии и изменений энтропии, необходимых для приготовления начального гауссова состояния $\rho_0 = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ с нулевым импульсом и большой дисперсией в координатном представлении, для которого численный эксперимент указывает на возникновение тока ΔI_t. Вполне возможно, что взаимодействие электронов проводимости с броуновским окружением может оказаться механизмом, приготовляющим состояния, близкие к ρ_0.

Литература

1. *Nagiel A.* // Harvard Sci. Rev. 2002. **15**, N 2. P. 11.
2. *Чеботарев А.М.* // Матем. заметки. 1978. **24**, № 5. С. 699.
3. *Chebotarev A.M., Maslov V.P.* // Lecture Notes in Phys. 1979. **106**. P. 58.
4. *Константинов А.А., Маслов В.П., Чеботарев А.М.* // УМН. 1990. **45**, № 6. С. 3.
5. *Chebotarev A.M., Quezada-Batalla R.* // Russian J. Math. Phys. 1996. **4**, N 3. P. 275.

Поступила в редакцию
05.06.06