Энергетическая диффузия в сильном шумовом поле

П. В. Елютин

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой электроники. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: pvelyutin@mtu-net.ru

Статья поступила 13.09.2009, подписана в печать 27.10.2009

Показано, что скорость энергетической диффузии квантового осциллятора под воздействием возмущения с непрерывным частотным спектром описывается выражением, формально следующим из золотого правила Ферми, даже тогда, когда условия применимости этого правила нарушены — в области параметров, где скорость перехода сравнима с частотой перехода между уровнями системы или превосходит ее. Этим обеспечивается согласие результатов квантового и классического значений скорости энергетической диффузии в квазиклассической области.

Ключевые слова: сильное поле, переходы, энергетическая диффузия, квантово-классическое соответствие.
УДК: 539.1.043. PACS: 42.50.Hz.

Введение

Переходы между стационарными состояниями автономной квантовой системы, вызванные нестационарным возмущением (внешним полем), приводят, как правило, к увеличению дисперсии энергии системы. Если переходы происходят с постоянными скоростями, то для системы, в начальный момент находившейся в стационарном состоянии, дисперсия со временем растет в среднем приблизительно по линейному закону, $\langle \Delta E^2(t)\rangle = 2Dt$ (угловые скобки означают усреднение по ансамблю реализаций). Этот процесс называют энергетической диффузией, а величину D — коэффициентом энергетической диффузии. Поглощение системой энергии внешнего поля является эпифеноменом энергетической диффузии, возникающим вследствие зависимости D от начальной энергии системы [1].

Сравним два класса моделей. К первому отнесем системы с несколькими степенями свободы, в которых невозмущенное движение классического аналога квантовой системы хаотично, а возмущение создается гармонически зависящим от времени полем. Такие модели представляют интерес, например, для описания возбуждения многоатомных молекул инфракрасным излучением [2, 3]. Ко второму классу отнесем системы с одной степенью свободы, в которых возмущение создается полем с непрерывным частотным спектром (шумовым полем). Такие модели представляют интерес, например, для описания ухода из метастабильного состояния системы, взаимодействующей с термостатом [4, 5], которое используется в расчетах скоростей химических реакций.

Эти два класса моделей тесно связаны, так как в основе описания обычно лежит одна и та же формула для скорости переходов.

Рассмотрим одночастичную систему с гамильтонианом вида $\hat{H} = \hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}}) - \hat{V}\cos\omega t$, где $\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})$ — гамильтониан невозмущенной системы, а $\hat{\boldsymbol{p}}$ и $\hat{\boldsymbol{r}}$ — декартовы операторы импульса и координаты, изначально находившуюся в стационарном состоянии $|n\rangle$ ($\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})|n\rangle = E_n|n\rangle$). Пусть движение классической системы частицы с энергией E_n является сильно хаотическим, почти эргодическим на этой энергетической поверхности. Тогда в квазиклассическом случае, когда постоянная Планка $\hbar$ мала в сравнении с характерным масштабом действия системы $\hat{H}_0$, т. е. $\hbar \to 0$, энергетический спектр $\hat{H}_0$ становится плотным, и скорости переходов могут быть найдены по золотому правилу Ферми:

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{nk}|^2\rho(E_k), \tag{1}$$

где $\rho(E)$ есть энергетическая плотность состояний системы $\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})$.

Пусть возмущение $\hat{V}$ представляет собой однородное поле: $\hat{V} = -F\hat{x}$. В квазиклассическом случае среднеквадратичные значения матричных элементов x_{nk} могут быть выражены через $S_x(E, \omega)$ — классический спектр мощности активной координаты x, входящей в оператор возмущения, взятый на начальной энергетической поверхности и на частоте гармонического возмущения [6, 7]:

$$|x_{nk}|^2 \approx \frac{S_x(E, \omega)}{\hbar\rho(E)}. \tag{2}$$

Из (1) и (2) следует выражение для коэффициента энергетической диффузии

$$D = \frac{\pi}{2}\omega^2 F^2 S_x(E, \omega). \tag{3}$$

Оно не содержит постоянной Планка и совпадает с результатом классического расчета.

Пусть теперь $\hat{H} = \hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}}) - \hat{V}\xi(t)$, где $\xi(t)$ — стационарный случайный процесс с непрерывным частотным спектром $S_\xi(\omega)$, а $\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})$ — гамильтониан произвольной системы с дискретным спектром. В этом случае при достаточно слабом возмущении скорость переходов в состояние $|k\rangle$ также постоянна и дается выражением

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|V_{nk}|^2 S_\xi(\omega_{kn}). \tag{4}$$

Пусть $\hat{V} = -F\hat{x}$, а $\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})$ описывает гармонический осциллятор с частотой ω_0. Поскольку при $\hbar \to 0$ матричный элемент координаты стремится к фурье-амплитуде $X(E)$ закона движения координаты, для коэффициента энергетической диффузии получаем

$$D = 2\pi\omega^2 F^2 X^2(E) S_\xi(\omega_0). \tag{5}$$

И это выражение не содержит постоянной Планка и совпадает с результатом классического расчета.

Сходство рассмотренных примеров подчеркивается тем, что иногда (см., напр., [8, 9]) формулы (1) и (4) объединяют в символическое выражение

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{nk}|^2\delta(E_n \pm \hbar\omega - E_k), \qquad (6)$$

где дельта-функция подразумевает последующее интегрирование по энергии (с весом $\rho(E)$) или по частотам возмущения (с весом $S_\xi(\omega)$). Выражение (6) наглядно демонстрирует заложенное в (1) и (4) ограничение: предполагается в точности резонансный характер переходов, а значит, возможность пренебречь скоростью переходов $\dot{W}_{nk}$ в сравнении с частотами возмущения (1) или перехода (4). С другой стороны, в квазиклассическом пределе $\hbar \to 0$ при фиксированных параметрах классической модели скорости переходов (1) и (4) неограниченно растут: $\dot{W}_{nk} \sim \hbar^{-2}$; иначе говоря, квазиклассический предел всегда лежит в области сильного поля. Возникает нестандартная ситуация: найденные из теории возмущений квазиклассические пределы квантовых коэффициентов энергетической диффузии (3) и (5) совпадают с классическими выражениями, но именно в квазиклассической области они не могут быть обоснованы с помощью теории возмущений.

В недавней работе [10] на примере модели Палена–Эдмондса в хаотической области было показано, что под действием гармонического возмущения скорость энергетической диффузии продолжает описываться выражением (3) и в области сильных полей, где $\dot{W}_{nk} \geqslant \omega$. Это расширение области применимости происходит благодаря тонкому эффекту дополнения собственно энергетической диффузии (т. е. некоррелированных переходов с увеличением и уменьшением энергии), которая в сильных полях растет медленнее, чем $|V^2|$, баллистическим транспортом энергии по цепочкам коррелированных матричных элементов, что и обеспечивает согласие результатов квантовой и классической теорий в пределе $\hbar \to 0$. Симметрия случаев «непрерывный частотный спектр системы + дискретный спектр поля» и «дискретный частотный спектр системы + непрерывный спектр поля» делает естественным допущение, что такое продолжение соответствия в область сильных полей существует и при воздействии шумового широкополосного излучения на систему с дискретным спектром.

Целью настоящей работы является доказательство этого допущения.

Компьютерный эксперимент

В качестве невозмущенной системы возьмем гармонический осциллятор (с частотой ω) в стационарном состоянии $|n \gg 1\rangle$, а оператор возмущения возьмем в виде $\hat{V}(t) = -F\xi(t)x$. В низшем приближении можно пренебречь зависимостью матричных элементов от номера уровня, считая $x_{m,m-1} = x_{m,m+1} = X$ для всех существенных m. Формула (4) описывает только не зависящую от времени компоненту скорости перехода. Более точный расчет в первом порядке теории возмущений приводит к выражению для дисперсии энергии

$$\Delta E^2(t) = 2\omega^2F^2X^2\left\langle\left|\int_0^t \xi(t')e^{i\omega t'}\,dt'\right|^2\right\rangle \equiv 2\omega^2F^2X^2G(t). \qquad (7)$$

Конкретизируем модель шума: возьмем его в виде гармонического колебания резонансной частоты, модулированного гауссовым экспоненциально коррелированным процессом. Полагая далее $\omega = 1$, запишем

$$\xi(t) = \eta(t)\cos t, \quad \langle\eta(t)\rangle = 0, \quad \langle\eta(t)\eta(t+\tau)\rangle = e^{-\gamma|\tau|}. \qquad (8)$$

Спектр такого процесса имеет вид суммы двух лоренцевских линий с центрами на частотах ± 1. Приведенная дисперсия энергии $2G(t)$ дается выражением

$$2G(t) = \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{4+\gamma^2}\right)t - \frac{3\gamma^4 + 8\gamma^2 + 16}{\gamma^2\left(4+\gamma^2\right)^2} + \\ + \sin 2t\frac{\gamma^2+2}{\gamma\left(4+\gamma^2\right)} - \cos 2t\frac{1}{4+\gamma^2} + \\ + e^{-\gamma t}\left(\cos 2t\frac{2\gamma^2}{\left(4+\gamma^2\right)^2} - \sin 2t\frac{6\gamma^2+8}{\gamma\left(4+\gamma^2\right)^2} + \frac{2\gamma^2+4}{\gamma^2\left(4+\gamma^2\right)}\right). \qquad (9)$$

Первый член в правой части, пропорциональный t, описывает переходы с фермиевской скоростью (5) (два слагаемых в скобке дают вклады двух лоренцианов). Второй, постоянный член описывает уменьшение вероятности перехода, отмеченное, например, в [11] и связанное с тем, что на начальном этапе эволюции переходы происходят со скоростью, меньшей (5). Незатухающие колебания на частоте второй гармоники описывают вклад от антирезонансных переходов (перехода вверх по энергии с испусканием кванта и обратного процесса). Наконец, экспоненциально убывающие члены играют роль только на начальном этапе $t \leqslant \gamma^{-1}$, пока не затухли корреляции шума.

Система уравнений для амплитуд стационарных состояний

$$i\frac{da_m}{dt} = \Omega\xi(t)e^{-it}a_{m+1} + \Omega\xi(t)e^{it}a_{m-1} \qquad (10)$$

интегрировалась численно для набора с $0 \leqslant m \leqslant 60$ при начальных условиях $a_m(0) = \delta_{m,30}$. Использовалось значение частоты Раби $\Omega = FX/\hbar = \sqrt{5/3} = 1.291$, которое соответствует значению коэффициента диффузии $D = 1$. Для описания шумового поля использовалась модель дискретных рандомизированных частот [12]: $\eta(t) = \sqrt{2/N}\sum_{k=1}^{N}\cos(\omega_k t + \theta_k)$, где частоты $\{\omega_k\}$ — случайные величины, имеющие распределение Коши–Лоренца с единичной шириной, что соответствует $\gamma = 1$, а фазы $\{\theta_k\}$ — случайные величины, равномерно распределенные на интервале $[0, 2\pi]$. При использованном числе гармоник $N = 10^3$ корреляционная функция имеет форму, близкую к экспоненциальной (8), вплоть до времени достижения остаточного уровня корреляций $B_\eta(\infty) \approx 0.03$.

На рис. 1 показана зависимость дисперсии энергии от времени, найденная усреднением решений системы (10) по четырем массивам, состоящим из 100 реализаций каждый. Ошибки показывают стандартное

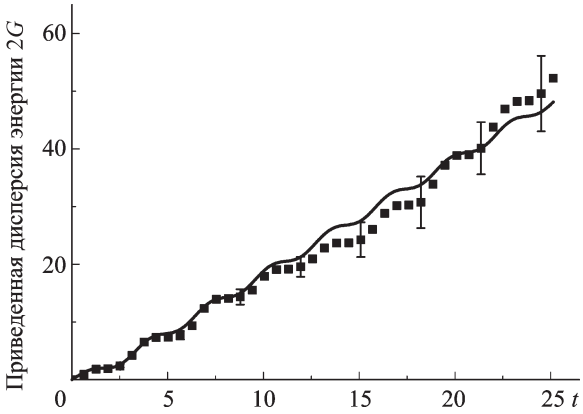

Рис. 1. Зависимость от времени приведенной дисперсии энергии $2G$ гармонического осциллятора в сильном шумовом поле (вычисленная по формуле (4) скорость перехода равна частоте перехода). Сплошная линия — расчет по формуле (9), точки — результаты численного эксперимента

отклонение между средними значениями для массивов. Видно хорошее согласие с формулой теории возмущений (9), хотя возмущение является настолько сильным, что формально вычисленная скорость перехода (4) равна частоте перехода.

Интересно сравнить поведение населенностей уровней $w_n(t) = |a_n(t)|^2$ с результатами модели, в которой скорости переходов между соседними уровнями постоянны и все равны $\dot{W}$. Решение системы балансных уравнений

$$\frac{dw_m}{dt} = -2\dot{W}w_m + \dot{W}w_{m-1} + \dot{W}w_{m+1}$$

с начальными условиями $w_m(0) = \delta_{mn}$ имеет вид

$$w_m(t) = \exp\bigl(-2\dot{W}t\bigr)I_{|n-m|}\bigl(2\dot{W}t\bigr), \qquad (11)$$

где $I_k(z)$ есть модифицированная функция Бесселя первого рода порядка k. На рис. 2 распределение населенностей, полученное из (11), сравнивается с найденным в численном эксперименте. Логарифм отношения этих населенностей L является сложной знакопеременной функцией отклонения от начального уровня m.

Аналитический расчет

При произвольном виде зависимости поля $\xi(t)$ от времени и начальных условиях $a_m(0) = \delta_{mn}$ решение системы (10) имеет вид

$$a_n(t) = e^{in\varphi}J_n(2|z|), \qquad (12)$$

где

$$z(t) = \Omega\int_0^t \xi(t')e^{i\omega t'}\,dt', \quad \varphi = -\frac{\pi}{2} + \arg z,$$

а $J_k(z)$ — функция Бесселя первого рода порядка k. Решение (12) есть обобщение известного в литературе [13] решения для случая гармонического возмущения ($\eta(t) = 1$) в приближении вращающегося поля и может быть проверено подстановкой разложений $J_k(z)$ в степенные ряды в уравнения (10). Используя соотношение [14]

$$\sum_{k=0}^{\infty} k^2 J_k^2(z) = \frac{z^2}{4},$$

вновь приходим к равенству (7) без ограничений на величину параметров задачи.

Отметим, что, хотя сами амплитуды вероятностей (12) определяются трансцендентными функциями и потому зависят от всех моментов распределения ξ, выражение для дисперсии энергии зависит только от дисперсии ξ.

Использованная выше модель гармонического осциллятора дает нулевое приближение для аппроксимации произвольной системы с одной степенью свободы в квазиклассической области. Устранение единственного сделанного нами приближения — предположения о постоянстве матричных элементов — не влияет на основной результат. Учет зависимости матричных элементов от n по теории возмущений приводит к классическому (не зависящему от $\hbar$) росту энергии системы со скоростью

$$\dot{E} = 2\pi\omega^2F^2\frac{dX^2}{dE}S_\xi(\omega_0) = \frac{dD}{dE}$$

и прежнему выражению для D в квазиклассическом пределе.

Выводы

Показано, что энергетическая диффузия в квантовом гармоническом осцилляторе, находящемся под воздействием широкополосного поля с произвольными формой спектра и статистикой, может быть описана с помощью формулы первого порядка теории возмущений (5) без ограничения на параметры задачи. Такое расширение применимости теории возмущений связано со взаимной компенсацией «бесселевых» осцилляций населенностей (см. (12)), подобных осцилляциям Раби в двухуровневой системе. Это расширение обеспечивает согласие результатов классической и квантовой теорий в пределе $\hbar \to 0$.

Из рис. 2 видно, что в сильном шумовом поле населенности уровней, далеких от начального, малы в сравнении с диффузионными значениями (11). Однако дисперсия энергии сохраняет то же значение благодаря дополнительным вкладам выбросов вероятности (при

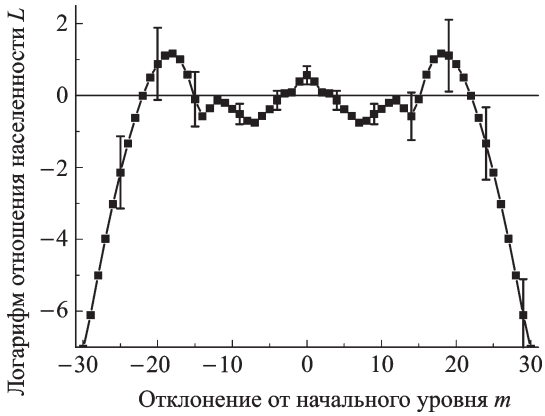

Рис. 2. Зависимость логарифма L отношения плотности вероятности, найденной в численном эксперименте, к плотности вероятности в диффузионной модели (11) от отклонения номера уровня от начально заселенного для значений $\dot{W} = 1$ и $t = 4\pi = 12.57$

$|m| \approx 20$ на рис. 2). Таким образом, механизм расширения применимости пертурбативного режима аналогичен описанному во введении для хаотических систем в гармоническом поле.

Можно ожидать, что подобное расширение будет иметь место и для произвольных невозмущенных систем $\hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{r}})$, как регулярных (интегрируемых), так и хаотических.

Автор благодарит за полезные обсуждения Л. В. Келдыша и А. А. Никулина.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке программы «Российские научные школы» (грант НШ 4464.2006.2) и РФФИ (грант 08-02-01020-А).

Список литературы

1. *Cohen D.* // Phys. Rev. Lett. 1999. **82**. P. 4951.
2. *Летохов В.С., Макаров А.А.* // УФН. 1981. **134**. С. 45.
3. *Залесская Г.А.* // ЖПС. 1998. **65**, № 5. С. 675.
4. *Elyutin P.V., Rogovenko A.N.* // Phys. Rev. E. 2001. **63**. P. 026610.
5. *Banerjee Dh., Banik S.K., Bag B.Ch.* et al. // Phys. Rev. E. 2002. **65**. P. 051105.
6. *Feingold M., Peres A.* // Phys. Rev. A. 1986. **34**. P. 591.
7. *Wilkinson M.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1987. **20**. P. 2415.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1989.
9. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. М., 1973.
10. *Elyutin P.V., Rubtsov A.R.* // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. **41**. P. 055103.
11. *Fearn H., Lamb W.E., Jr.* // Phys. Rev. A. 1991. **43**. P. 2124.
12. *Пригарин С.М.* Методы численного моделирования случайных процессов и полей. Новосибирск, 2005.
13. *Акулин Б.М., Карлов Н.В.* Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике. М., 1987.
14. *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М, 1963. С. 994, формула 8.536.1 при $n = 1$.

Energy diffusion in the strong noise field

P. V. Elyutin

Department of Quantum Electronics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.
E-mail: pve@shg.phys.msu.su, pvelyutin@mtu-net.ru.

The rate of the energy diffusion for the quantum oscillator under the influence of the perturbation with the continuous frequency spectrum is found to obey the expression, that formally follows from the Fermi golden rule, even when the conditions of applicability of the rule are violated, i. e., in the range of parameters' values, in which the transition rate is comparable to the frequency of transition between the system levels or exceeds it. This result stipulates the agreement of classical and quantum energy diffusion rates in the quasiclassical domain.

Keywords: strong field, transitions, energy diffusion, quantum-classical correspondence.
PACS: 42.50.Hz.
Received 13 September 2009.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2010).

Сведения об авторе

Елютин Павел Вячеславович — канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент;
тел.: (495) 939-11-04, e-mail: pve@shg.phys.msu.su, pvelyutin@mtu-net.ru.