Краткие сообщения по физике № 6-1984 г.

БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ В НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЕ

А.Д. Заикин

УДК 537.312.62

Построена теория, описывающая поведение квантовых частиц, взаимодействующих с неравновесной средой. Получено эффективное действие и уравнение Ланжевена. В стационарном случае вычислены функции Грина - Келдыша таких частиц.

В последнее время большое внимание уделяется исследованиям поведения квантовомеханических систем, взаимодействующих со средой, число степеней свободы которой макроскопически велико. Это обстоятельство в значительной мере обусловлено возможностью постановки экспериментов по проверке применимости описания сложных макроскопических систем с помощью линейных уравнений квантовой механики. Подробное обсуждение такого рода вопросов содержится в работе /1/.

Общий подход для описания эволюции квантовой системы, характеризуемой обобщенной координатой q и взаимодействующей с другой системой с обобщенной координатой Q, был развит Фейнманом и Верноном /2,3/. Их теория была использована Шмидом /4/ для получения квантового уравнения Ланжевена, описывающего поведение частицы в равновесной системе, представляющей собой набор гармонических осцилляторов. В настоящей работе мы исследуем особенности поведения квантовой частицы, взаимодействующей с неравновесной средой, которую будем также моделировать большим числом гармонических осцилляторов.

Полный гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H(q,Q,t) = m\dot{q}^2/2 + V(q) + H(Q,t) - \sum_k Q_k(F_k(t) + gq),$$

где $H(Q,t)$ - гамильтониан (в общем случае неравновесной) системы осцилляторов среды, $F_k(t)$ - внешняя классическая сила, действующая на эти осцилляторы, g - константа взаимодействия обобщенной координаты q с этими осцилляторами.

Эволюция системы описывается с помощью величины

$$J = \sum_{Q^i,Q^f} |\langle f| \exp[-(i/\hbar)\int_{t_i}^{t_f} \hat{H}dt]|i\rangle|^2,$$

которую, как известно, удобно представить в виде:

$$J = \sum_{Q^i,Q^f} \int Dq(t)\prod_k DQ_k(t)\exp\{(i/\hbar)S_C[q,Q]\},$$

$$S_C[q,Q] = \int_C dt L(q,Q),$$

$L(q,Q)$ - лагранжиан рассматриваемой системы, C - контур, соединяющий пары точек $t_i + io$, $t_f + io$ и $t_f - io$, $t_i - io$. Далее везде будем считать $t_i \to -\infty$, $t_f \to \infty$.

Поскольку нашей задачей является описание поведения системы q, нам будет удобно перейти к эффективному действию, зависящему только от этой обобщенной координаты. Такой подход осуществляется с помощью интегрирования по степеням свободы Q_k, которое легко проводится, если известны функции Грина - Келдыша /5/ осцилляторов среды. Имеем

$$J = \int DxDy\exp(iS_{eff}/\hbar),$$

$$S_{eff}[x,y] = \int dt\{m\dot{x}\dot{y} + V(x - y/2) - V(x + y/2) + (g/2)^2\sum_k m_k^{-1}\omega_k^{-2} \times$$

$$\times \int dt'[y(t)G_k(t,t')y(t') - 2(x(t) + F_k(t)/g)G_k^A(t,t')y(t') -$$

$$- 2y(t)G_k^R(t,t')(x(t') + F_k(t')/g)]\},$$

где $x(t) = [q(t + io) + q(t - io)]/2$, $y(t) = q(t + io) - q(t - io)$, m_k и ω_k - соответственно масса и частота к-го осциллятора среды, а функции $G_k(t,t')$, $G_k^{R,A}(t,t')$ являются элементами матричной функции Грина - Келдыша:

$$\hat{G}_k = \begin{pmatrix} 0 & G_k^A \\ G_k^R & G_k \end{pmatrix}.$$

Положив теперь *)

$$V(x+y/2) - V(x-y/2) \cong yV'(x) \tag{1}$$

и используя условие $y(\pm\infty) = 0$, получаем

$$S_{eff}[x,y] = \int dt \Big\{ y(t)[-m\ddot{x}(t) - V^{*\prime}(x,t) - 2i\eta \int dt' K^R(t,t')x(t') + + i\eta K(t,t')y(t')]\Big\}. \tag{2}$$

Здесь мы ввели обозначения

$$V^*(x,t) = V(x) + g\sum_k \int dt' G_k^R(t,t')F_k(t')m_k^{-1}\omega_k^{-2} \tag{3}$$

$$i\eta K^R(t,t') = (g^2/2)\sum_k G_k^R(t,t')m_k^{-1}\omega_k^{-2},$$

$$i\eta K(t,t') = (g^2/4)\sum_k G_k(t,t')m_k^{-1}\omega_k^{-2}. \tag{4}$$

Рассмотрим теперь функционал следующего вида:

$$Z[\alpha,\beta,h] = N^{-1}\int DxDy\exp\Big\{(i/\hbar)[S_{eff} + \int dt(\alpha x + \beta y + h\zeta]\Big\},$$

$$N = \int DxDy\exp(iS_{eff}/\hbar), \tag{5}$$

$$\zeta(t) = m\ddot{x} + V^{*\prime}(x,t) + 2i\eta\int dt' K^R(t,t')x(t'). \tag{6}$$

При $h = 0$ функционал (5) представляет собой производящий функционал для функций Грина - Келдыша частицы в среде. Подставляя в (5) выражение для S_{eff} (2) и интегрируя по переменной y, получим

$$Z[\alpha,\beta,h] = N^{-1}\int Dx\exp[-\frac{1}{4\hbar\eta}\iint dt dt'(\zeta(t)+\beta(t))K^{-1}(t,t')(\zeta(t')+\beta(t'))] \tag{7}$$

---

*) Условия, при которых справедливо пренебрежение следующими членами разложения по y в формуле (5), подробно исследованы в работе /4/. Если $V(x)$ - потенциал гармонического осциллятора, то соотношение (5) является точным.

При $\alpha = \beta = 0$ вычисление (7) проводится тривиально, так что для коррелятора случайной силы сразу имеем:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t')\rangle = \frac{\delta^2 Z[0,0,h]}{\delta h(t)\,\delta h(t')}\bigg|_{h=0} = 4\eta K(t,t'). \qquad (8)$$

Равенство (6) (с учетом соотношений (3), (4), (8)) представляет собой обобщение уравнения Ланжевена для квантовой частицы на случай взаимодействия с неравновесной средой. Интересно отметить, что наличие внешней силы, "раскачивающей" осцилляторы среды, приводит к перенормировке потенциала $V(x)$, причем соответствующий дополнительный член (см. (3)) пропорционален первой степени константы взаимодействия g (в отличие от величины η, пропорциональной g^2). Выражения для коэффициента вязкости η, а также для $K(t,t')$ и $K^R(t,t')$ зависят от модели среды (и, следовательно, от конкретной процедуры суммирования), а также от характера неравновесности. Рассмотрим ситуацию, при которой усредненные свойства среды не зависят явно от времени. При этом функции Грина - Келдыша зависят лишь от разности времен. Выражения для этих функций хорошо известны:

$$G_k^{R,A}(\epsilon) = \omega_k^2/[(\epsilon \pm i0)^2 - \omega_k^2], \quad G_k(\epsilon) = (1 + 2n_k(\epsilon))\,(G_k^A(\epsilon) - G_k^R(\epsilon)),$$

где $n_k(\epsilon)$ - число заполнения фононных состояний. Для набора трехмерных осцилляторов процедура суммирования заключается в замене

$$\sum_k m_k^{-1}(\ldots) \Rightarrow (2\pi)^{-3}\rho^{-1}\int d^3k(\ldots),$$

ρ - плотность среды. При линейном законе дисперсии фононов получаем

$$\eta = g^2/2\pi\rho c^3, \quad K(\epsilon) = \epsilon(n(\epsilon) + 1/2), \quad K^R(\epsilon) = -\epsilon/2.$$

Член, описывающий затухание в уравнении (6), при этом имеет обычный вид $\eta\dot{x}$, а коррелятор случайной силы выражается через $h(\epsilon)$. Если $h(\epsilon)$ - бозевские средние числа заполнения, т.е. ситуация равновесна, то сразу приходим к флуктуационно-диссипационной теореме. При $F_k(t) = F(t)$ выражение для $V^*(x,t)$ принимает совсем простой вид $V^*(x,t) = V(x) + \eta x\dot{F}(t)/g$.

Наконец, приведем выражения для функций Грина - Келдыша частицы в неравновесной среде: $\hat{G}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} + \hat{\Sigma}$.

$$\hat{G}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 2i[m\epsilon^2 - i\eta\epsilon - m\omega_0^2]^{-1} \\ 2i[m\epsilon^2 + i\eta\epsilon - m\omega_0^2]^{-1} & 4\eta K(\epsilon)[m^2(\epsilon^2 - \omega_0^2)^2 + \eta^2\epsilon^2]^{-1} \end{pmatrix}.$$

Здесь мы обозначили $V(x + y/2) - V(x - y/2) = xy\omega_0^2 + \delta V(x,y)$, Σ - собственно-энергетические части, которые вычисляются, как обычно, суммированием диаграммного разложения по степеням δV.

Таким образом, с помощью техники Келдыша удается непосредственно обобщить теорию /2-4/ на случай неравновесных систем.

Поступила в редакцию 5 декабря 1983 года.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.J. Leggett, Prog. Theor. Phys., Suppl., 69, 80 (1980).
2. R.P. Feynman, F.L. Vernon, Ann. Phys. (N.Y.), 24, 118 (1963).
3. Р. Фейнман, А. Хибс, Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", М., 1968 г.
4. A. Schmid, J. Low Temp. Phys., 49, 609 (1982).
5. Л.В. Келдыш, ЖЭТФ, 45, 1515 (1964).