ОБОЗРЕНИЕ
ПРИКЛАДНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ
Том 23 МАТЕМАТИКИ Выпуск 4
2016

О. В. Алифанов (Москва, МИСиС)**. Температурно-временные зависимости квантовой динамики броуновской частицы в среде с большим трением.**

Исследованы температурные и временны́е зависимости динамики броуновской частицы, исходя из представления о квантовой тепловой случайной силе, действующей на частицу в среде с большим трением, и обусловленной тепловыми флуктуациями среды. Указанное представление основано на процедуре квантования [1] классического уравнения диффузии:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \tag{1}$$

для функции распределения вероятностей $f(x,t)$ частицы с координатой x в момент времени t и коэффициентом диффузии D, пропорциональным квантовой средней энергии E теплового резервуара:

$$D = \frac{E}{\gamma} = \frac{\hbar\omega}{2}\operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\text{Б}}T}\right) \tag{2}$$

(в отличие от классической энергии, равной $k_{\text{Б}}T$), где γ — коэффициент затухания, $\hbar$ — постоянная Планка, $k_{\text{Б}}$ — постоянная Больцмана. Тепловой резервуар трактуется как совокупность квантовых гармонических осцилляторов с собственной частотой ω в равновесном состоянии при температуре T. Выполняя преобразование координат $(x_1, x_2) \to (x, \eta\hbar)$ для разности двух уравнений диффузии вида: $x_1 = x - \hbar\eta/2$, $x_2 = x + \hbar\eta/2$ и преобразование Фурье функции $f(x,\eta,t)$:

$$W(x,p,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,\eta,t)e^{ip\eta}\,d\eta,$$

приходим к квантовому уравнению диффузии в фазовом пространстве (x,p,t):

$$\dot{W}_t = D\ddot{W}_{xx} - \frac{4p^2}{\hbar^2}W, \tag{3}$$

зависящему от времени, где p — импульс частицы, точки над W обозначают соответствующие частные производные. Уравнение движения частицы в форме (3) позволяет записать такое его приближенное решение, которое соответствует начальному условию (в виде произведения $Delta$-функции Дирака)для классической функции распределения вероятности:

$$W(x,p;t=0) = \frac{1}{\pi\hbar}e^{-p^2/(\hbar\gamma)-\gamma x^2/\hbar}. \tag{4}$$

Решение (3) с начальным условием (4) имеет вид

$$W(x,p;t) = \frac{1}{\pi\hbar}e^{-x^2/(4B(t))-4B(t)p^2/\hbar^2}, \tag{5}$$

где функция

$$B(t) = \frac{\hbar}{2\gamma}\left(\frac{1}{2} + t\omega\operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\text{Б}}T}\right)\right) \tag{6}$$

имеет смысл среднего квадрата смещения частицы $\langle x^2(t)\rangle$ в момент времени t при температуре T. С учетом соотношения неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta X(t)\Delta P(t) = \hbar/2,$$

в котором введено обозначение

$$\Delta X(t) \equiv \sqrt{\langle x^2(t)\rangle}, \quad \Delta P(t) \equiv \sqrt{\langle p^2(t)\rangle},$$

из (6) следует выражение для квантовой тепловой силы, зависящей от времени t и температуры T:

$$F(t,T) = \frac{d}{dt}[\Delta P(t)] = -\left(\frac{\gamma\hbar}{2}\right)^{1/2}\omega \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\text{Б}}T}\right)\left(1 + 2\omega t \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\text{Б}}T}\right)\right)^{-3/2}. \quad (7)$$

Выражение (7) получено в пренебрежении инерцией частицы для больших времен $t \to \infty$. Знак "$-$"в (7) означает, что квантовая тепловая сила имеет характер притяжения. Оценки показывают [1], что по порядку величины тепловая сила сравнима с силой Казимира, но, в отличие от нее, является нелокальной функцией, подобной квантовому потенциалу Бома [2].

Численные расчеты температурной зависимости, представленные на рис. 1, показывают, что для малых времен $(t < 1/\omega)$ тепловая сила имеет хорошо выраженный минимум при некоторой температуре T_0. При $T < T_0$ она возрастает (по модулю) с ростом температуры, а при $T > T_0$ уменьшается приблизительно как $-T^{-1/2}$. При больших временах $(t \gg l/\omega)$ тепловая сила увеличивается (по модулю) при низких T до некоторого значения, а затем при высоких T остается постоянной. Вообще говоря, могут реализоваться разные температурные зависимости для тепловой силы, которые определяются параметрами задачи: собственной частотой ω колебаний среды и коэффициентом затухания γ. Что касается зависимости силы (7) от времени, то и при высоких, и при низких температурах сила монотонно убывает (по модулю) как $-t^{-3/2}$.

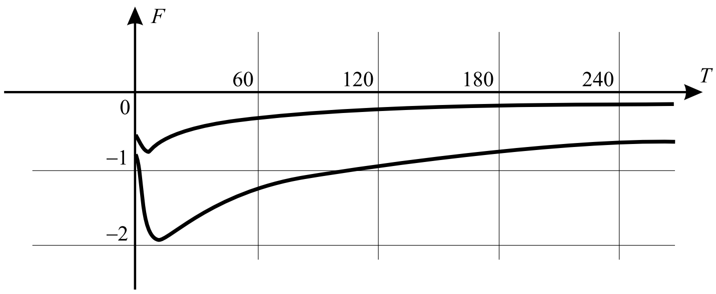

Рис. Зависимость тепловой силы F (в единицах $\omega(\hbar\gamma/2)^{1/2}$) от температуры T (в единицах $T_e = \hbar\omega/2$) для разных времен: нижняя кривая соответствует $t = 0{,}2/\omega$), верхняя — $t = 1/\omega$

Возвращаясь к уравнению диффузии (3), заметим, что можно найти его точное решение с начальным условием в виде (4). Результатом теперь будет выражение, аналогичное (5), но с заменой функции $B(t)$ из (6) на другую функцию, $A(t)$, которая определяется из решения уравнения:

$$D^{-1}\frac{dA}{dt} = 1 + \frac{\hbar^2}{8p^2}\left(A - \frac{\hbar^2 x^2}{16p^2}A^{-1}\right)^{-1}. \quad (8)$$

Уравнение (8) имеет точное решение в неявном виде. Численные расчеты показывают, что функция $A(t)$ имеет скачок при некотором значении t_0 в области значений $A \sim \hbar x/(4p)$. Это приводит к изменению температурной зависимости тепловой силы, не изменяя ее притягивающего характера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bolivar A. O.* Time-dependant attractive thermal quantum force upon a Brownian free partical in large friction regime. — ArXiv preprints, arXive 1004.0527, 2010. http://arxiv.org.
2. *Bohm D.* A suggested interpretation of quantum theory in the term of «hidden» variables. — Phys. Rev., 1952, v. 85, p. 166–193.