

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

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

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):

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

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

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 ( $\omega$  — случайный параметр).

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

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

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

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

В результате уравнение (2) приобретает следующий вид:

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

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

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

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

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

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

$$\hat{p}_t = U_{0,t} \hat{p} U_{0,t}^* = \hat{p} + P_\omega(t), \quad P_\omega(t) = \int_0^t F_\omega(s) ds,$$

$$\hat{x}_t = U_{0,t} \hat{x} U_{0,t}^* = \hat{x} + \hat{p}t + X_\omega(t), \quad X_\omega(t) = \int_0^t P_\omega(s) ds.$$

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

$$\begin{aligned} \hat{V}_t &= U_{0,t} V(\hat{x}) U_{0,t}^* = \varkappa \int_{\mathbb{R}} \mu(dq) e^{-iq\hat{x}_t + i\alpha(q)} = \\ &= \varkappa \int_{\mathbb{R}} \mu(dq) e^{i(-1/2)q^2 t - qX_\omega(t) + \alpha(q) - qpt} e^{q(\partial/\partial p)}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varphi}(p,t)}{\partial t} &= \left( \frac{1}{i} \hat{V}_t - \varkappa \right) \tilde{\varphi}(p,t) = \\ &= \varkappa \int_{\mathbb{R}} \mu(dq) \left( e^{iS(p,q,t)} \tilde{\varphi}(p+q,t) - \tilde{\varphi}(p,t) \right), \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S(p,q,t) &= -\frac{1}{2} q^2 t - qX_\omega(t) + \alpha(q) - \frac{\pi}{2} - qpt, \quad (5) \\ \tilde{\varphi}(p,0) &= \tilde{\psi}_0(p). \end{aligned}$$

Это уравнение в силу принципа Дюамеля эквивалентно интегральному уравнению

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p,t) &= e^{-\varkappa t} \tilde{\psi}_0(p) + \varkappa \int_0^t d\tau e^{-(t-\tau)\varkappa} \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}} \mu(dq) \tilde{\varphi}(p+q,\tau) e^{iS(p,q,\tau)}, \end{aligned}$$

решение которого может быть записано в виде абсолютно сходящегося ряда

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p,t) &= e^{-\varkappa t} \left\{ \tilde{\psi}_0(p) + \sum_{n=1}^{\infty} \varkappa^n \int_0^t \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_1 \dots dt_n \times \right. \\ &\times \int_{\mathbb{R}} \mu(dq_1) \dots \int_{\mathbb{R}} \mu(dq_n) \tilde{\psi}_0 \left( p + \sum_{k=1}^n q_k \right) \times \\ &\times \exp \left( i \sum_{k=1}^n S \left( p + \sum_{j=0}^{k-1} q_j, q_k, t_k \right) \right) \left. \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

### 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 движется 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,  $\tau_j$  — случайное время ожидания  $j$ -го скачка,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{q_j = \pm n\} &= \frac{1}{2} \frac{n^{-1}}{\sum_1^K k^{-1}}, \quad \mathbb{P}\{\tau_j > T\} = e^{-\varkappa T}, \\ \varkappa &= V_0 \sum_{k=1}^K k^{-1} \end{aligned}$$

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]:

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

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

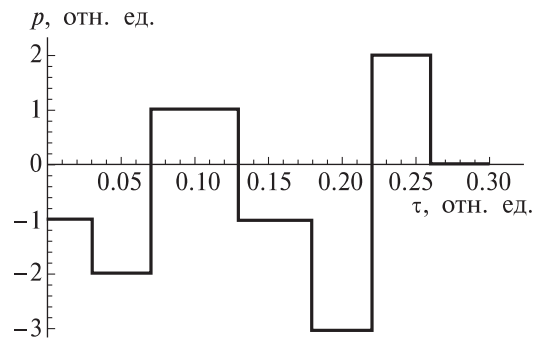


Рис. 1. Пример марковского скачкообразного процесса

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

$$\Delta p_t = e^{2\kappa t} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\varphi}^*(p, t) \hat{p} \tilde{\varphi}(p, t) dp.$$

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

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

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

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

Из принципа двойной рандомизации вытекает сле-

дующее выражение для  $\Delta p_t$ :

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

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

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

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

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

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

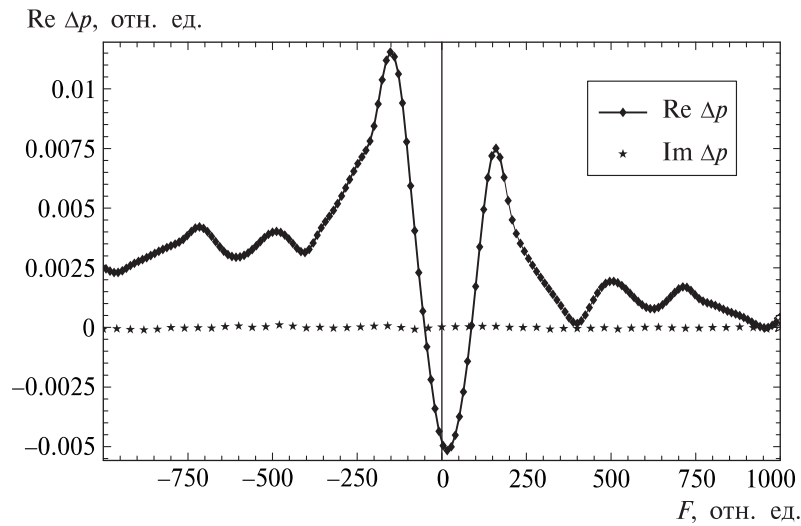


Рис. 2. Характерный вид зависимости  $\Delta p(F)$  при  $x_0 = 0$

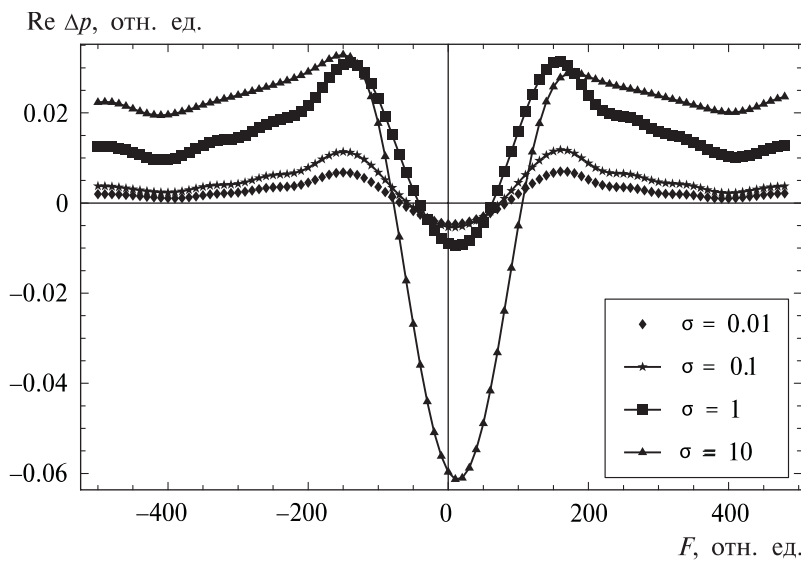


Рис. 3. Зависимость  $\text{Re } \Delta p(F)$  для различных значений  $\sigma$  при  $x_0 = 0$

где

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

Можно показать, что математическое ожидание для  $\Delta p_t$  сходится со скоростью, пропорциональной  $e^{x_0 t} / \sqrt{N}$ , а для вычислительных целей в качестве грубой оценки погрешности можно использовать мнимую часть выборочного среднего значения импульса, которая в пределе при  $N \rightarrow \infty$  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 рат-

чет-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  $\Delta p_t$  (или — с точностью до множителя — величины среднего тока  $\Delta I_t$ ) 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  $\text{Im} \Delta p$ , дающая представле-

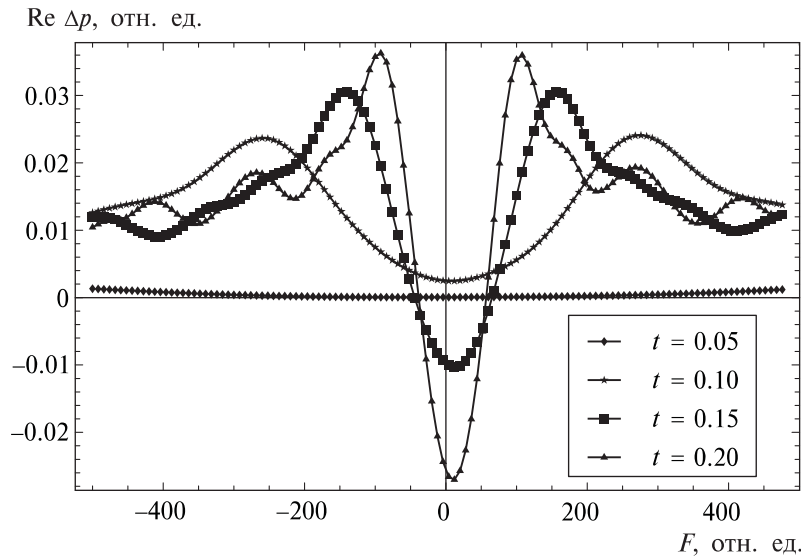


Рис. 4. Зависимость  $\text{Re} \Delta p(F)$  для различных значений  $t$  при  $x_0 = 0$

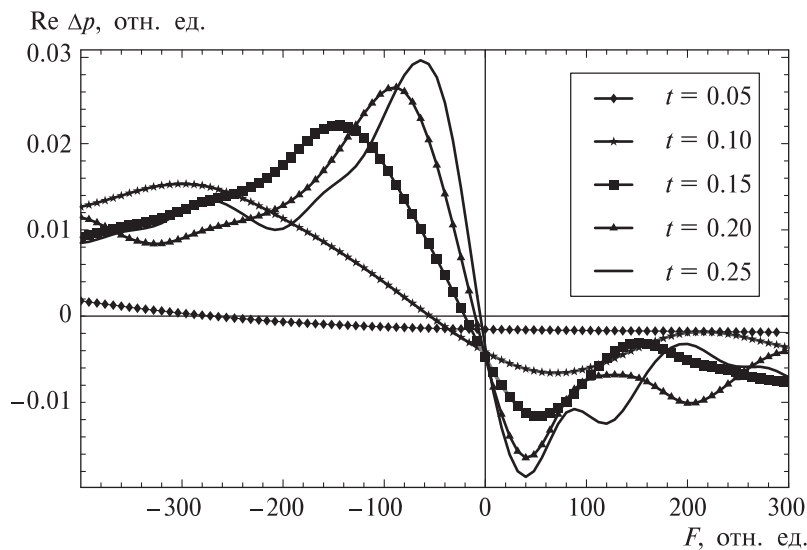


Рис. 5. Зависимость  $\text{Re} \Delta p(F)$  для различных значений  $t$  при  $x_0 = 1$

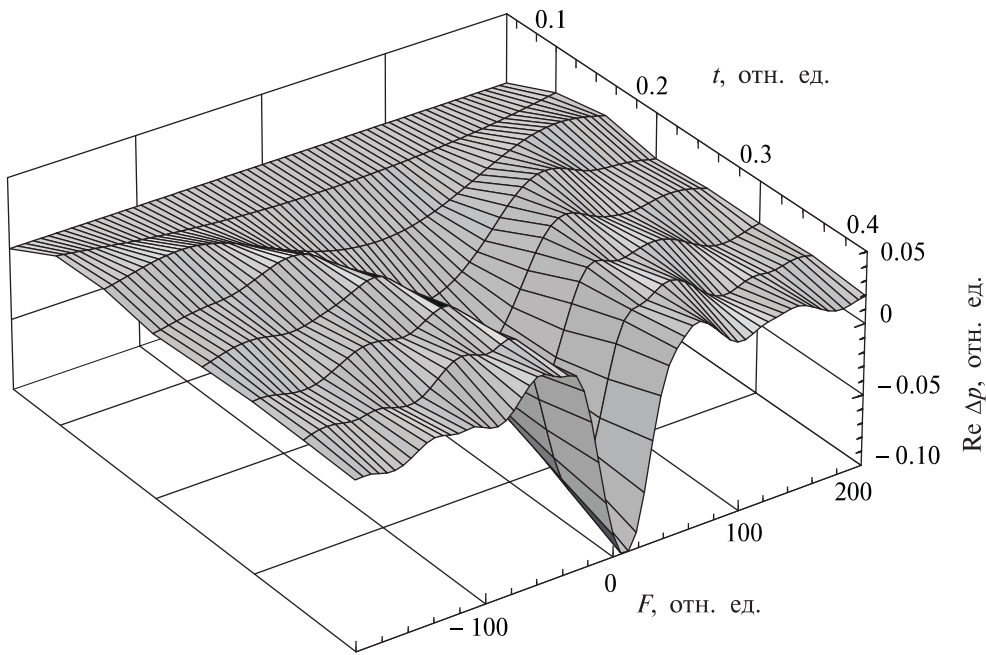


Рис. 6. Зависимость  $\text{Re } \Delta p(F, t)$  при  $x_0 = 0$

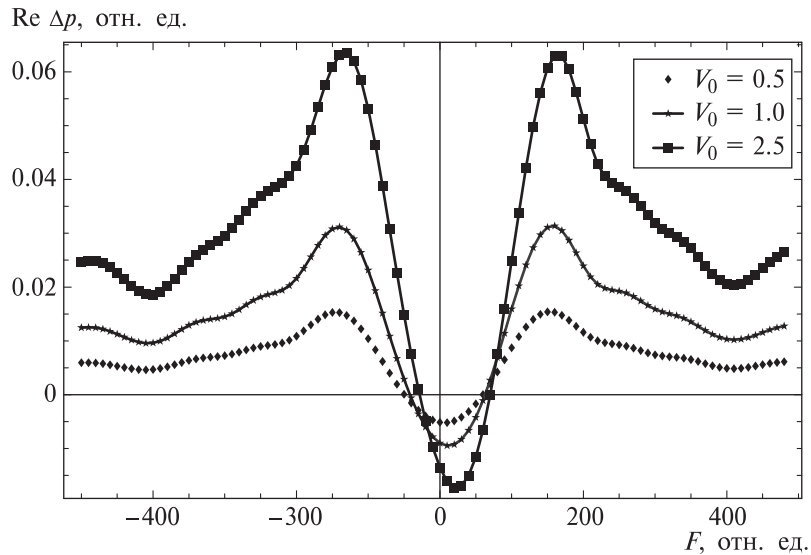


Рис. 7. Зависимость  $\text{Re } \Delta p(F)$  для различных значений  $V_0$  при  $x_0 = 0$

ние о величине погрешности численного эксперимента.

На рис. 3 изображена зависимость среднего импульса от величины приложенного внешнего поля при различных значениях ширины волнового пакета  $\sigma$ . 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  $\text{Re } \Delta p(F)$  для различных значений амплитуды ратчет-потенциала, 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 гауссо-

ва 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  $\Delta I_t$ . Вполне возможно, что взаимодействие электронов проводимости с броуновским окружением может оказаться механизмом, przygotowującym состояния, близкие к  $\rho_0$ .

### 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