

Опыт численного моделирования смешанного состояния сверхпроводников, примененный к исследованию нестационарного уравнения Шредингера

А.Э. Филиппов

Донецкий физико-технический институт НАН Украины им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: filippov_ae@yahoo.com

Статья поступила в редакцию 17 марта 2009 г., после переработки 23 июня 2009 г.

Опыт численного моделирования сверхпроводящих систем использован для исследования поведения нестационарной волновой функции вдали от равновесия. Показано, что нормировка волновой функции играет роль эффективного нелокального взаимодействия, которое приводит к локализации волновой функции в одной из ям даже при инфинитизимальной разнице их глубин. Это принципиально отличается от решения уравнения Фоккера–Планка, которое в равновесии экспоненциально зависит от энергии и для близких по глубине ям практически симметрично. При флуктуационном (малом) изменении соотношения глубин на обратное максимум волновой функции «туннелирует» в другую яму. Рассмотрен также переход в одноямном потенциале из возбужденного состояния в более низкое. Показано, что он сопровождается излучением локализованного фрагмента электромагнитной волны, который может быть отождествлен с «фотоном».

Досвід чисельного моделювання надпровідникових систем використано для дослідження поведінки нестационарної волнової функції далеко від рівноваги. Показано, що норміровка волнової функції відіграє роль ефективної нелокальної взаємодії, що призводить до локалізації волнової функції в одній із ям, навіть при інфінітимальній різниці їх глибин. Це принципово відрізняється від рішення рівняння Фоккера–Планка, яке у рівновазі експоненціально залежить від енергії і для близьких по глибині ям практично симетрично. При флуктуаційній (малій) зміні співвідношення глибини на звороті максимум волнової функції «тунелює» у другу яму. Досліджено також перехід в одноямному потенціалі із збудженого становища у більш низьке. Показано, що він супроводжується випромінюванням локалізованого фрагменту електромагнітної хвилі, яке може бути уотожнено з «фотоном».

PACS: 03.65.–w Квантовая механика;

03.65.Ta Основы квантовой механики, теория измерений.

Ключевые слова: уравнения Гинзбурга–Ландау, уравнение Шредингера, нестационарное.

1. Введение. Использование опыта моделирования сверхпроводников в решении уравнения Шредингера

Уравнение Шредингера (УШ) позволило объяснить и рассчитать множество квантовых эффектов. Однако из-за аналитических трудностей имеется лишь небольшой набор хорошо известных точных результатов и приближенных схем решения этого уравнения, которые не исчерпывают всех проблем теории. Применительно к теории сверхпроводимости, УШ было модифицировано к форме уравнений Гинзбурга–Ландау

(УГЛ) [1]. Многочисленные приложения этой теории стимулировали численное решение УГЛ вдали от равновесия, в различной геометрии, для многокомпонентных полей и при разнообразных граничных условиях (см., например, [2–4]). Этот опыт теперь может быть перенесен обратно в фундаментальную теорию.

Формально УШ и УГЛ отличаются следующим:

1. УГЛ являются диссипативными, т.е. имеют форму уравнений диффузии с нелинейной правой частью:

$$\eta \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\kappa\phi \right) \psi = - \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right)^2 \psi + (1 - |\psi|^2) \psi. \quad (1)$$

Нелинейность ограничивает нарастание волновой функции ψ (параметра порядка) и избавляет от необходимости ее нормировки как в теории, так и при численном решении УГЛ. Кроме того, нелинейность типа «теории ϕ^4 » делает численную схему самостабилизируемой. В отличие от УШ, нормировка, т.е. суммарная плотность параметра порядка, в УГЛ не сохраняется, что соответствует реальной эволюции системы при фазовых переходах или при вхождении магнитного поля и токов в сверхпроводник. Столь же реальным в этих уравнениях является присутствие поля и токов, которые формально входят через калибровочно-инвариантные «длинные» производные для четырехкомпонентного вектор-потенциала (ϕ, \mathbf{A})

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi = -\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{J}_s + \nabla \times \mathbf{H};$$

где ток:

$$\mathbf{J}_s = \text{Re} \left[\psi^* \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right)^2 \psi \right], \quad (2)$$

и образуют совместно с комплексным полем $\psi = \psi_1 + i\psi_2$ замкнутую систему.

2. УШ является динамическим:

$$i \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\kappa\phi \right) \psi = - \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right)^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi. \quad (3)$$

В отличие от УГЛ, для незаряженных частиц оно может рассматриваться отдельно от калибровочного электромагнитного поля, вырождаясь при этом в «стандартное» УШ:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\Delta \psi + U(\mathbf{r})\psi. \quad (4)$$

Для замкнутой системы в бесконечном пространстве УШ сохраняет все интегралы движения, присущие динамическим системам, а также нормировку волновой функции:

$$\int_V |\psi|^2 = 1. \quad (5)$$

Реальная система всегда конечна и открыта. Помимо обмена энергией и импульсом, она может обмениваться частицами с «квантовым вакуумом», так что нормировка ψ -функции, вообще говоря, может не сохраняться. Кроме того, численное решение ограничено некоторым массивом, что вынуждает *принудительно фиксировать нормировку* при каждом шаге счета.

Задание нормировки эквивалентно дополнительному допущению, что частица не покидает области, в которой рассматривается движение, и связано с известным парадоксом Эйнштейна–Подольского–Розена.

Математически сохранение интеграла $\int_V |\psi|^2$ по всему пространству эквивалентно *нелокальному взаимодействию*, которое одновременно перенормирует ψ -функцию по всему объему. Кроме того, оно делает

уравнение эффективно нелинейным. Возможно, в физической реальности, стоящей за феноменологией УШ, мы имеем дело с коллективным многочастичным поведением, которое на уровне линейного УШ удается редуцировать к единственному интегральному вкладу — условию нормировки [5].

2. Поведение волновой функции в двухъямном потенциале

Представляет интерес распространить кинетический подход теории сверхпроводимости на исследование динамики комплексных полей, задаваемой УШ с фиксированной нормировкой. А именно: в пространстве размерности $d = 1, 2, 3$ с заданной формой границы в присутствии потенциалов $U(r)$ и постоянно действующих источников шума (флуктуаций) задавать физически мотивированное (в том числе «random») начальное распределение комплексного поля $\psi = \psi_1 + i\psi_2$ и следить за его спонтанной эволюцией. Для сверхпроводников такой метод действительно приводит к наблюдаемому поведению фазового упорядочения, вхождению магнитного поля, возникновению вихрей и т.п.

Тестовые численные эксперименты с УШ в форме (4), (5) выполнялись для ряда стандартных задач квантовой механики: отражение от барьеров и туннелирование, дифракция и интерференция на двух и более отверстиях, стационарные состояния в потенциальной яме и т.п. Уравнения в частных производных решались стандартным методом, в котором, например, уравнение $i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\Delta \psi + U(x)\psi$ заменяется его дискретным аналогом

$$i\psi_{\kappa+1,j} = i\psi_{\kappa,j} + \Delta t \cdot [(\psi_{\kappa,j+1} + \psi_{\kappa,j-1} - 2\psi_{\kappa,j}) / \Delta x + U(x_j)\psi_{\kappa,j}]$$

и пошагово итерировается параллельно для обеих комплексных компонент $\psi_{\kappa,j} = \psi_{1,\kappa,j} + i\psi_{2,\kappa,j}$. Пакет MatLab, в частности, оперирует непосредственно с комплексными матрицами $\psi_{\kappa,j} = \psi_{1,\kappa,j} + i\psi_{2,\kappa,j}$ размерности $\{2 \cdot j_{\max} k_{\max}\}$ при $j = 1, 2, \dots, j_{\max}$; $k = 1, 2, \dots, k_{\max}$. В конкретных численных процедурах были использованы:

- 1) одномерные $\{x_j\}$ и двумерные $\{x_j, y_j\}$ пространственные массивы, содержащие по 10^4 и $10^3 \cdot 10^3$ элементов соответственно;
- 2) нулевые $\psi(x_{\min}) = \psi(x_{\max}) = 0$ или периодические граничные условия в зависимости от конкретной физической задачи;
- 3) принудительное восстановление нормировки $\psi_{\kappa,j} \rightarrow \psi_{\kappa,j} = \psi_{\kappa,j} \sum_j |\psi_{\kappa,j}|^2 |_{t=0} / \sum_j |\psi_{\kappa,j}|^2$ на каждом шаге счета.

Важно еще раз подчеркнуть, что использованный метод решения связанных уравнений в частных производных является абсолютно стандартным, не имеющим никаких вычислительных преимуществ и рутинно

используемым в физике, в том числе и для моделирования кинетики сверхпроводников. До известной степени «оригинальной» является лишь идея применить такой же подход к старым классическим задачам.

Выполненные эксперименты дают ожидаемые результаты во всех статических асимптотиках, доступных проверке аналитической теорией. Численное моделирование может быть использовано как для проверки аналитических результатов, так и в преподавании, поскольку дает доступный и наглядный способ визуализации классических решений УШ. При этом, например, непосредственно на дисплее видно, как в соответствии с теорией, статические распределения получаются только для плотности вероятности $|\psi|^2$, тогда как комплексные компоненты $\psi_{1,2}$ осциллируют с частотой, определяемой энергией E_k конкретного состояния.

Далее подробно остановимся лишь на двух *нетривиальных* сценариях поведения. Один из них получается при рассеянии «частицы» на двухъямном потенциале $U(r)$. Если потенциал строго симметричен, то частица должна с одинаковой вероятностью бывать в его ямах. Однако в реальности всегда есть флуктуации. Заимствованный из физической кинетики опыт решения уравнения Фоккера–Планка [6] формирует интуитивное ожидание, что при малом различии ям

$\delta U \ll |U_{\min}|$ не только суммарные вероятности их заполнения будут мало различаться, но и вся функция распределения $|\psi|^2$ будет близка к обратной экспоненте от потенциала $|\psi(\mathbf{r})|^2 \propto \exp(-U(\mathbf{r}))$.

Решение УШ показывает, что в квантовой механике это не так. Если ямы достаточно разнесены в пространстве и глубоки, так что в каждой из них возможен дискретный уровень энергии, то даже при $\delta U \ll |U_{\min}|$ распределение полностью локализуется в той из них, которая глубже. Более того, при слабом «шевелении» потенциала, когда неравенство глубин ям меняется на обратное, т.е. $\delta U \rightarrow -\delta U$, распределение $|\psi(\mathbf{r})|^2$ за конечное время «туннелирует» из одной ямы в другую. На рис. 1 показаны начальное, некоторое промежуточное и близкие к стационарным распределения, полученные численно для одномерного потенциала $U(r) = -ar^2 + br^4$ при малом возмущении $\delta U \sim \delta r$. Такие же результаты были получены и для $2d$ -случая. Случай $1d$ здесь и далее изображен только потому, что для него можно привести статическое изображение временной эволюции плотности $|\psi(\mathbf{r}; t)|^2$ в виде пространственно-временной карты. В частности, такой сценарий для описанного выше процесса представлен на рис. 2, где плотность $|\psi(\mathbf{r}; t)|^2$ представлена градациями серого для каждого момента времени t .

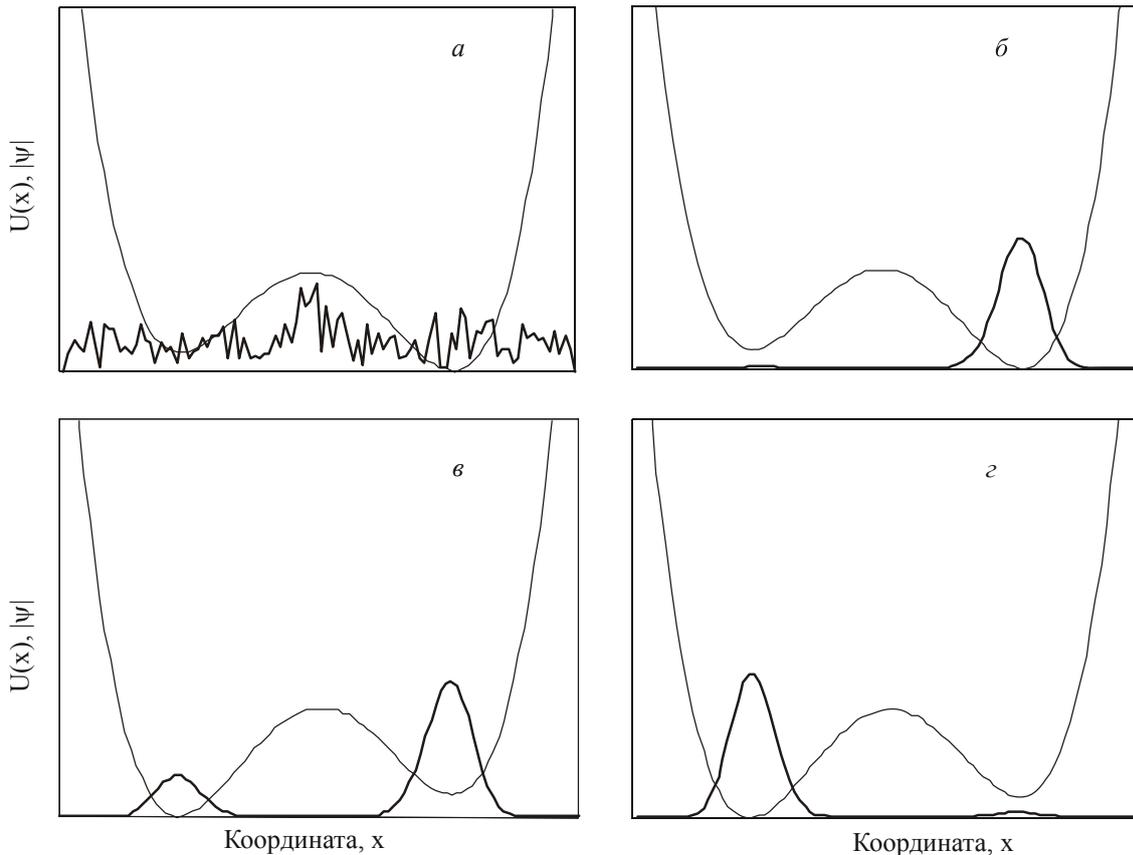


Рис. 1. Характерные стадии эволюции ψ -функции (жирная линия) в двухъямном потенциале (тонкая линия), численно полученные для потенциала $U(r) = -ar^2 + br^4$ начальное случайное (random) распределение ψ -функции (а); локализация ψ -функции в более глубокой яме (показан момент, когда локальный максимум $|\psi|$ во второй яме практически исчез, но еще виден как «гид для глаз») (б); промежуточное состояние в процессе «туннелирования» после смены соотношения минимумов потенциала (в); близкая к завершению стадия «туннелирования», на которой максимум в первой яме постепенно исчезает (з).

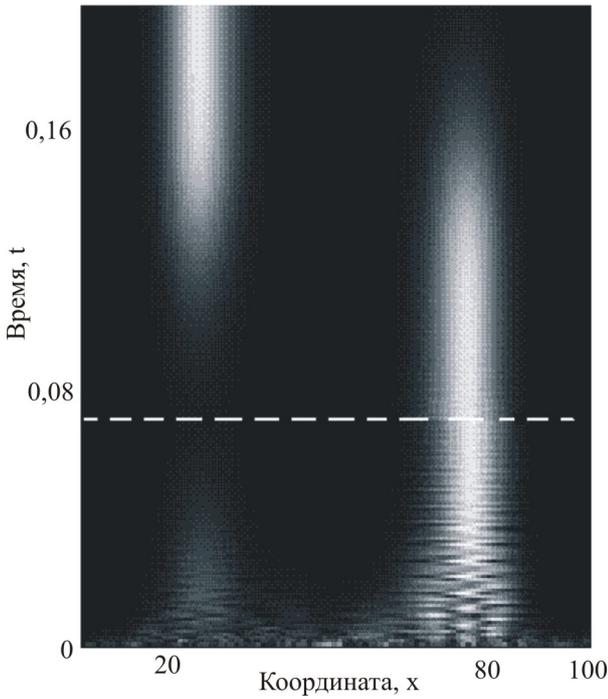


Рис. 2. Пространственно-временная карта эволюции плотности вероятности $|\psi(\mathbf{r};t)|^2$, показанная градиациями яркости серого цвета, соответствующая сценарию, описанному в тексте. Момент «флуктуационного» переключения соотношения глубин ям $\delta U \rightarrow -\delta U$ помечен штриховой линией. Характерная рябь при малых временах t соответствует переходному процессу при случайном начальном распределении $\psi(\mathbf{r};t=0)$.

Хорошо видны как спонтанная локализация $|\psi(\mathbf{r};t)|^2$ в одной из ям $U(r)$ в ходе начального переходного периода, так и «туннелирование» после принудительного изменения их глубин. Момент изменения знака δU отмечен штрих-пунктирной линией.

Физически это означает, что частица всегда выбирает нижайший на данный момент минимум. Но из-за взаимодействия с флуктуациями термостата («прибором») сами минимумы могут оказываться глубже других с различной вероятностью, в зависимости от их характерной глубины в среднем по времени, что и приводит к тому, что частица может наблюдать в разных состояниях, но всегда «целиком». Чем чище организован эксперимент, тем реже флуктуации, и тем «парадоксальнее» будет выглядеть случайное обнаружение частицы только в одном, заранее неизвестном состоянии.

Математически полная локализация плотности распределения в одной из ям связана с нелокальным взаимодействием через общую для всего массива нормировку и сродни известному в вычислительной математике «генетическому алгоритму поиска экстремума» [7]. В ограниченной системе и при нулевых условиях на границе $\psi(x_{\min}) = \psi(x_{\max}) = 0$ система постоянно теряет энергию. При этом «поток частиц» скомпенсирован принудительным сохранением нормировки на каждом шаге счета

$$\Psi_{k,j} \rightarrow \psi_{k,j} = \Psi_{k,j} \frac{\sum_j |\Psi_{k,j}|^2 |_{t=0}}{\sum_j |\psi_{k,j}|^2}.$$

В результате система эволюционирует к нижайшему энергетическому состоянию. В отличие от формального «генетического алгоритма», где полная конденсация плотности в минимуме $U(\mathbf{r})$ разрешена, наличие градиентного слагаемого в функционале энергии:

$$H = \frac{1}{2} \int_V [|\nabla\psi|^2 + U(\mathbf{r})|\psi|^2] \quad (6)$$

при фиксированной нормировке, т.е. ненулевой плотности $|\psi(\mathbf{r};t)|^2$, не допускает полной конденсации. Процесс естественным образом останавливается на основном состоянии, являющемся нижайшим по энергии решением уравнения:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\Delta\psi + U(\mathbf{r})\psi = 0 \quad (7)$$

при условии $\int_V |\psi|^2 = 1$. Более высокие по энергиям состояния все же удается реализовать численно либо при достаточной энергии начального распределения $\psi(\mathbf{r};t=0)$, либо путем стимуляции шумом. Эти состояния, вообще говоря, глобально неустойчивы и разрушаются флуктуациями. Наиболее устойчивые состояния удается получить, заранее выбрав функцию $\psi(\mathbf{r})$ вблизи одного из возбужденных состояний (для кулоновой ямы, например, известных аналитически), отличных от основного состояния по симметрии. Например, в качестве начального в симметричной яме, где функция основного состояния симметрична, выбрать асимметричное распределение $\psi(r;t=0) = -\psi(-r;t=0)$, что создает «топологический» барьер, надолго стабилизирующий возбужденное состояние. Это наблюдение оказывается полезным ниже.

3. Излучение при переходе с уровня на уровень

Полная система уравнений для описания заряженных частиц включает, помимо собственно нестационарного УШ $i\left(\frac{\partial}{\partial t} + ik\phi\right)\psi = -\left(\frac{i}{\kappa}\nabla + \mathbf{A}\right)^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi$ с условием нормировки $\int_V |\psi|^2 = 1$, также уравнения (2)

для 4 компонент вектор-потенциала (ϕ, \mathbf{A}) : $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\phi = -\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{J}_s + \nabla \times \mathbf{H}$ и потока «частиц» J_s . Подобная по составу система уравнений для сверхпроводников успешно работает и даже дает состояния с различным значением момента при вхождении вихрей в мезоскопические таблетки, включая тонкое расщепление уровней энергии в зависимости от симметрии их упорядочения [3]. До известной степени такие состояния даже можно интерпретировать как искусственные «мезоскопические атомы». Можно ожидать, что если система УШ с вектор-потенциалом верна, то при спонтанном или стимулированном переходе между стационар-

ными состояниями она также воспроизведет естественным образом излучение конечного фрагмента электромагнитной волны (фотона). В остальное время излучение должно отсутствовать.

Результаты численного решения системы (2)–(4) суммированы на рис. 3, 4, 5. В качестве начального было выбрано антисимметричное состояние $\psi(r; t = 0) = -\psi(-r; t = 0)$, близкое к стационарному. В переходном процессе система спонтанно релаксирует к «точному» стационарному состоянию, которое с учетом конечности и дискретности численного массива всегда требует небольшой адаптации. После этого малым (по сравнению с амплитудой последующего перехода) возмущением был введен дисбаланс между амплитудами ветвей антисимметричной функции $\psi(r) = -\psi(-r)$, в результате которого развилась неустойчивость, и система за конечное время перешла в четное основное состояние $\psi(r) = \psi(-r) \equiv \psi_0(r)$. В ходе процесса был прогенерирован конечный цуг электромагнитной волны (фотон).

Нетривиальным здесь является именно наблюдение *конкретного процесса развития неустойчивости вдали от обоих равновесий*, которое не может быть описано теорией возмущений. В частности, оказалось, что процесс идет не в виде постепенного нарастания одной и угасания другой ветви модуля ассиметричной волновой функции $\psi(r; t)$. Вместо этого в *системе развиваются колебания*, так что обе ветви попеременно нарастают и уменьшаются со все большей амплитудой, вплоть до достижения одной из них некоторой *сепаратриссы* («седловой точки» в функциональном пространстве), после чего другая ветвь постепенно угасает, а вся функция притягивается к *аттрактору* — четному основному состоянию $\psi_0(r) = \psi_0(-r)$.

Из рис. 3–5 следует, что именно переходные коле-

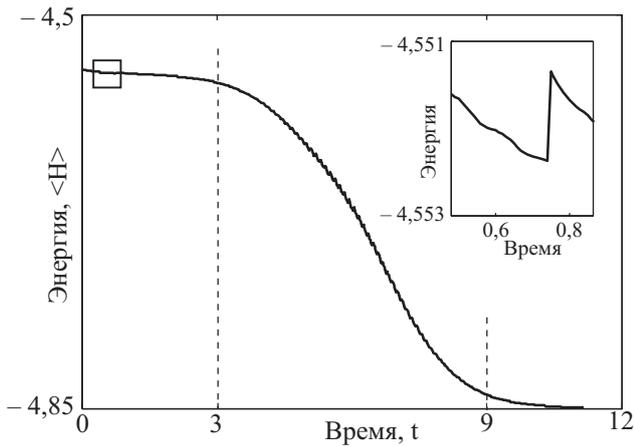


Рис. 3. Изменение полной энергии при стимулированном переходе из возбужденного антисимметричного состояния в симметричное основное состояние. На вставке показан малый скачок энергии E в момент стимуляции перехода (помеченный прямоугольником на основном графике). Область интенсивной генерации электромагнитного излучения выделена штриховыми линиями.

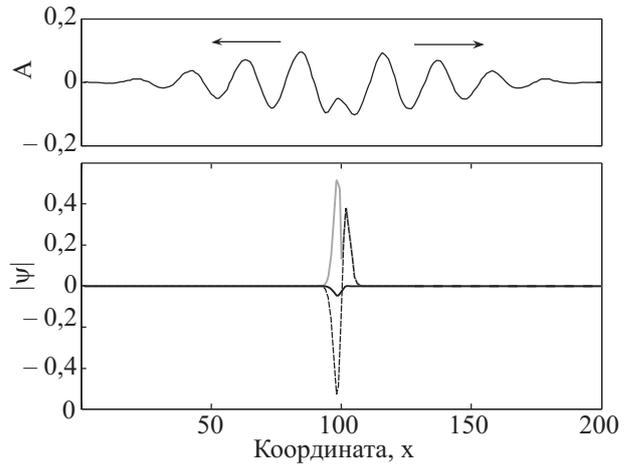


Рис. 4. Типичные мгновенные распределения плотности нетривиальной компоненты вектор-потенциала (в $1d$ -системе), модуля ψ -функции (жирная серая кривая) и двух ее компонент $\psi_{1,2}$ (сплошная и штриховая линии соответственно на фоне жирной серой) в области интенсивной генерации электромагнитного поля $A(\mathbf{r}; t)$. Стрелками показаны направления движения волн.

бания ψ -функции вдали от равновесия порождают генерацию волны вектор-потенциала A . Проинтегрировав плотность потока энергии электромагнитного поля, можно убедиться, что энергия прогенерированного «фотона» совпадает с энергией перехода (что, собственно, есть лишь проверка решения, так как определяется динамическим характером исходных уравнений). Следует подчеркнуть также, что соответствии с общей теорией в численных экспериментах в обоих стацיו-

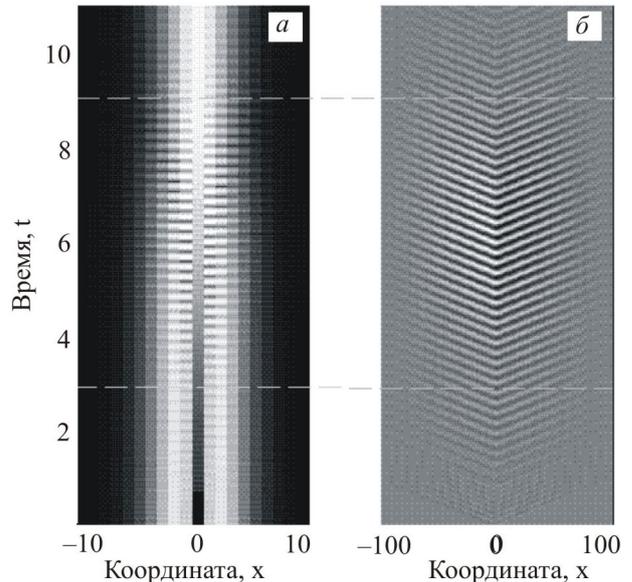


Рис. 5. Пространственно-временные карты плотности модуля ψ -функции и нетривиальной компоненты вектор-потенциала $A(\mathbf{r}; t)$ (фрагменты (а) и (б) соответственно), показанные градациями яркости. Видны колебания ветвей ψ -функции в противофазе и бегущие электромагнитные волны. Область интенсивной генерации соответствует большому контрасту бегущих волн и выделена штриховыми линиями.

нарных состояниях генерация поля отсутствует, хотя вещественная и мнимая компоненты ψ -функции осциллируют с частотой, определяемой энергией $\psi_{1,2} \sim \exp(-iEt)$.

4. Заключение

Непосредственное численное решение нестационарного уравнения Шредингера вдали от равновесия может быть использовано как для проверки и иллюстрации известных аналитических результатов, так и для продвижения в область существенно неравновесных квантовых процессов и их более глубокого понимания. В частности, даже простейшие приложения подхода к известным проблемам: обнаружение частицы в двухъямном потенциале при флуктуациях окружения и излучение при переходе между уровнями, позволяют по-новому взглянуть на проблему квантовых наблюдений и их «копенгагенскую интерпретацию». Квантовые явления могут и должны быть рассмотрены как динамические, развернутые во времени процессы. Широко применяемая в феноменологической теории редукция квантовых процессов к начальному и конечному стационарным состояниям и «скачкам» между ними приводит к известным «парадоксам», которые в настоящее время могут быть конструктивно преодолены на базе имеющихся вычислительных возможностей.

Численные эксперименты свидетельствуют в пользу существования в процессах, описываемых УШ, тех же явлений, что характерны для всех динамических процессов в многокомпонентных и/или нелинейных системах: притяжение к динамическим аттракторам (сопровожаемое возникновением порядка из хаоса), развитие неустойчивостей при достижении некоторых сепаратрис (седловых точек) в функциональном пространстве, генерация нетривиальных плотностей тех полей, которые симметрично разрешены в системе, но пренебрежимо малы на начальных стадиях процесса и т.п.

Наблюдение колебательного процесса при переходе между уровнями открывает путь для конструктивного исследования вопроса о связи структуры волновой функции стационарных состояний в УШ и энергией фотонов. С одной стороны, пространственная дисперсия волновой функции однозначно фиксируется коэффициентом при градиентных слагаемых уравнения, т.е. в конечном счете постоянной Планка \hbar . С другой, те же градиенты определяют динамический переходный процесс, и в частности, частоту колебаний ψ -функции. Это делает постоянную Планка в УШ не просто «подгоночной константой», которая позволяла получить взаимное соответствие между энергией фотонов и расстоянием между уровнями, а на самом деле общей константой единого процесса излучения.

Учитывая опыт работы с многокомпонентными, $2d$ - и $3d$ -системами, а также со взаимодействующими полями в кинетике сверхпроводников [4], этот подход был обобщен автором на системы соответствующей

размерности, а также небольшого числа взаимодействующих частиц $N = 1, 2, 3 \dots$, т.е. именно на ту область, которая не может быть исследована в термодинамическом пределе $N \gg 1$, но чрезвычайно актуальна с учетом потребностей физики наномира.

1. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1978).
2. V.V. Moshchalkov, L. Gielen, C. Strunk, R. Jonckheere, X. Qiu, C. Van Haesendonck, and Y. Bruynseraede, *Nature* **373**, 319 (1995).
3. A.K. Geim, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and K.S. Novoselov, *Nature* **390**, 259 (1997).
4. A.E. Filippov, A.V. Radievsky, and A.S. Zeltser, *Phys. Rev.* **B54**, 3504 (1996).
5. A.E. Filippov, *Phys. Lett.* **A215**, 32 (1996).
6. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* Springer, Berlin (1996).
7. Michael D. Vose, *The Simple Genetic Algorithm: Foundations and Theory*, MIT Press, Cambridge, MA (1999).

Application of the experience of numerical simulation of the mixed state of superconductors to a study of non-stationary Schrödinger equation.

A.E. Filippov

The previous experience of numerical simulation of superconducting systems is applied to study the behavior of nonstationary wave function far from the equilibrium. It is shown that the normalization of the wave function plays a role of effective nonlocal interaction which leads to a localization of the function in one of the potential valleys even at infinitesimally small difference between deepness of the valleys. This principally differs from the solution of Fokker-Planck equation which exponentially depends on energy and which is practically symmetric for the valleys close in deepness. At a fluctuation change of the deepness relation into the inverse one the maximum of the wave function «tunnels» from the initial valley into another one. The transition from the excited state a lower one is also studied. It is shown that the transition is accompanied by the emission of a fragment of electromagnetic wave which can be associated with a «photon».

PACS: 03.65.-w Quantum mechanics;
03.65.Ta Foundations of quantum mechanics; measurement theory

Keywords: Ginzburg-Landau equations, Schrödinger equation, non-stationary.