

P11-2003-114

Е. П. Жидков, Ю. Ю. Лобанов, В. Д. Рушай

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ
ПРИБЛИЖЕННОГО ФУНКЦИОНАЛЬНОГО
ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО УСЛОВНОЙ МЕРЕ ВИНЕРА**

1 Введение

Задача описания временной эволюции открытых квантовых систем (ОКС), т.е. систем, взаимодействующих с окружающей их средой, интересна как с практической, так и с методологической точки зрения поскольку, строго говоря, все реальные системы являются открытыми. В рамках такого подхода естественным образом описываются неравновесные необратимые процессы, сопровождающиеся диссипацией энергии, что находит применение в различных областях квантовой физики и химии.

Для описания динамики ОКС используется оператор плотности $\hat{\rho}(t)$, с помощью которого можно находить средние значения любых физических величин, характеризующих квантовую систему. Матричные элементы этого оператора в координатном представлении для некоторого момента времени t могут быть выражены через его матричные элементы в момент t_0 , $0 \leq t_0 < t$, посредством равенства [1],[2]

$$\langle x|\hat{\rho}(t)|x' \rangle = \int dx_0 \int dx'_0 J(x, x', t; x_0, x'_0, t_0) \langle x_0|\hat{\rho}(t_0)|x'_0 \rangle. \quad (1)$$

В рамках формулировки квантовой механики на основе интегралов по траекториям Фейнман и Вернон [1] предложили модель, в которой пропагатор J выражается через двойной интеграл по траекториям

$$J = \int_{(t_0, x_0)}^{(t, x)} Dx(\tau) \int_{(t_0, x'_0)}^{(t, x')} Dx'(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S[x(\tau)] - S[x'(\tau)]) \right\} F_{infl}[x(\tau), x'(\tau)], \quad (2)$$

где $S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t (m\dot{x}^2/2 - V(x, \tau)) d\tau$ - классическое действие для рассматриваемой системы, находящейся в потенциальном поле $V(x)$, которое в этой работе будет полагаться не зависящим от времени; F_{infl} - некоторый функционал, описывающий взаимодействие этой системы с окружающей ее средой. Следует заметить, что поведение квантовой системы в любой среде можно описать с помощью выражения (2), если известен соответствующий функционал влияния F_{infl} [3]. Можно, таким образом, утверждать, что в рамках фейнмановской формулировки квантовой механики это представление для пропагатора имеет наиболее общий вид.

Фейнман и Вернон получили выражение для функционала влияния в предположении среды, состоящей из гармонических осцилляторов, линейно связанных с рассматриваемой квантовой системой. Подход, основанный на явных моделях среды, развивался также в работах [4]-[6]. Струнц получил функционал влияния с помощью аксиоматического подхода [2]. Найти явное выражение для пропагатора удается лишь в некоторых частных случаях. В более общих случаях можно использовать приближенные методы. Кроме того, существует проблема строгого определения интеграла по траекториям [7]. Развивая один из подходов к построению строгой теории интеграла Фейнмана, Хаба [8] выразил пропагатор для уравнения Шредингера через функциональный интеграл по условной мере Винера. В связи с появлением эффективных методов приближенного вычисления интегралов Винера [9]-[12] становится привлекательной идея обобщения этого результата на случай пропагатора (2) для ОКС. В разделе 2 эвристически получена формула, выражающая этот пропагатор через двойной функциональный интеграл по условной мере Винера. Практическая применимость этой формулы, а также эффективность используемого приближенного метода исследуется в разделе 3 на некоторых примерах. В разделе 4 описывается

процедура, позволяющая увеличивать точность вычислений. Область применимости предлагаемого подхода обсуждается в разделе 5.

2 Представление пропагатора для ОКС в форме интеграла Винера

По аналогии с построениями Камерона [13], который ввел понятие интеграла Винера с параметром σ , в работе [14] была получена формула, выражающая интеграл по условной мере Винера с параметром $\sigma > 0$ для функционала $F[x(\tau)]$ через интеграл по условной нормированной мере Винера с интегрированием по единичному отрезку времени:

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} F[x(\tau)] d\tilde{W}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2 t}\right\} \int_{C[0, 0; 1, 0]} F[\sigma\sqrt{t}x(\tau) + (x-x_0)\tau + x_0] d\tilde{W}^*(x). \quad (3)$$

Здесь $C[0, x_0; t, x]$ - множество непрерывных на отрезке $[0, t]$ функций $x(\tau)$, удовлетворяющих условиям $x(0) = x_0$, $x(t) = x$; соответственно $C[0, 0; 1, 0]$ - множество непрерывных на отрезке $[0, 1]$ функций $x(\tau)$, для которых $x(0) = x(1) = 0$. Выражение в левой части равенства (3) соответствует фейнмановской амплитуде перехода $K(x, t; x_0, 0)$, если положить $\sigma = \sqrt{i\hbar/m}$ и $F[x(\tau)] = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(x(\tau)) d\tau\right\}$. Таким образом, в предположении справедливости равенства (3) для мнимых σ^2 была получена формула [14]

$$K(x, t; x_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left\{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar t}\right\} \times \int_{C[0, 0; 1, 0]} \exp\left\{-\frac{it}{\hbar} \int_0^1 V\left(\sqrt{\frac{i\hbar t}{m}}x(\tau) + (x-x_0)\tau + x_0\right) d\tau\right\} d\tilde{W}^*(x).$$

Подобное равенство было получено ранее в упомянутой работе Хабы [8]. Аналогичным образом при $\sigma = \sqrt{-i\hbar/m}$ и $F[x(\tau)] = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(x(\tau)) d\tau\right\}$ из (3) следует выражение для комплексно-сопряженной амплитуды перехода:

$$K^*(x, t; x_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left\{\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar t}\right\} \times \int_{C[0, 0; 1, 0]} \exp\left\{\frac{it}{\hbar} \int_0^1 V\left(\sqrt{-\frac{i\hbar t}{m}}x(\tau) + (x-x_0)\tau + x_0\right) d\tau\right\} d\tilde{W}^*(x).$$

Формулу (3) можно обобщить на случай l -кратного функционального интеграла, в котором интегрированию по множеству $C[0, x_{0k}; t, x_k]$ функций $x_k(\tau)$ соответствует некоторый параметр $\sigma_k > 0$, $k = 1, \dots, l$:

$$\int_{\Omega} F[x_1(\tau), \dots, x_l(\tau)] d\tilde{W}_{\sigma_1}(x_1) \dots d\tilde{W}_{\sigma_l}(x_l) = \quad (4)$$

$$\prod_{k=1}^l \left[\frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi t}} \exp \left\{ -\frac{(x_k - x_{0k})^2}{2\sigma_k^2 t} \right\} \right] \int_{C^l[0,0;1,0]} F[\sigma_1 \sqrt{t} x_k(\tau) + (x_1 - x_{01})\tau + x_{01},$$

$$\dots, \sigma_l \sqrt{t} x_l(\tau) + (x_l - x_{0l})\tau + x_{0l}] d\tilde{W}^*(x_1) \dots d\tilde{W}^*(x_l),$$

$\Omega = C[0, x_{01}; t, x_1] \times C[0, x_{02}; t, x_2] \times \dots \times C[0, x_{0l}; t, x_l]$.

При $l = 2$ формальная подстановка параметров $\sigma_1 = \sqrt{i\hbar/m}$, $\sigma_2 = \sqrt{-i\hbar/m}$ и функционала

$$F[x_1(\tau), x_2(\tau)] = \exp \left\{ -\frac{it}{\hbar} \int_0^1 (V(x_1(\tau)) - V(x_2(\tau))) d\tau \right\} F_{infl}[x_1(\tau), x_2(\tau)]$$

в формулу (4) приводит при $x_1(\tau) \equiv x(\tau)$, $x_2(\tau) \equiv x'(\tau)$ к следующему выражению для пропагатора (2)

$$J(x, x', t; x_0, x'_0, 0) = \frac{m}{2\pi\hbar t} \exp \left\{ i \frac{m(x - x_0)^2}{2\hbar t} \right\} \exp \left\{ -i \frac{m(x' - x'_0)^2}{2\hbar t} \right\} \times \quad (5)$$

$$\int_{C^2[0,0;1,0]} F \left[\sqrt{\frac{i\hbar t}{m}} x(\tau) + (x - x_0)\tau + x_0, \sqrt{-\frac{i\hbar t}{m}} x'(\tau) + (x' - x'_0)\tau + x'_0 \right] d\tilde{W}^*(x) d\tilde{W}^*(x').$$

Остается открытым вопрос об условиях для потенциала $V(x)$ и функционала влияния F_{infl} , при которых равенство (5) справедливо.

3 Примеры приближенных вычислений

Для вычисления интеграла в правой части (5) в этой работе будет использована формула для приближенного вычисления кратных функциональных интегралов по условной нормированной мере Винера, полученная в [10],[11]

$$\int_{C^l[0,0;1,0]} F[x_1(\tau), \dots, x_l(\tau)] d\tilde{W}^*(x_1) \dots d\tilde{W}^*(x_l) \approx \frac{1}{2^l} (2\pi)^{-N/2} \int_{R^N} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{s=1}^l \sum_{j=1}^{k_s} (u_j^{(s)})^2 \right\} \times \quad (6)$$

$$\sum_{j=1}^l \int_{-1}^1 F[U_{k_1}(u^{(1)}), \dots, \Theta_j(\alpha(v, t)), \dots, U_{k_l}(u^{(l)})] du dv.$$

Здесь $\mathbf{u} = (\mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(l)})$, $\mathbf{u}^{(s)} = (u_1^{(s)}, \dots, u_{k_s}^{(s)})$, $N = \sum_{s=1}^l k_s$,

$$U_{k_s}(\mathbf{u}^{(s)}) = \sum_{j=1}^{k_s} u_j^{(s)} \frac{\sqrt{2}}{j\pi} \sin(j\pi t),$$

$$\Theta_j(\alpha(v, t)) = \sqrt{l}(\alpha(v, t) - P_{k_s}(v, t)) + U_{k_s}(\mathbf{u}^{(s)}),$$

$$P_{k_s}(v, t) = \sum_{j=1}^{k_s} \frac{2}{j\pi} \sin(j\pi t) \cos(j\pi v) \text{sign}(v),$$

$$\alpha(v, t) = \begin{cases} -t \text{sign}(v), & t \leq |v|, \\ (1-t) \text{sign}(v), & t > |v|. \end{cases}$$

Таким образом, вычисление кратного функционального интеграла сводится к вычислению обычного (риманова) интеграла кратности $N + 1$. Точность формулы (6) увеличивается с ростом N [11].

Ниже приведены примеры расчетов матрицы плотности по формуле (1) с использованием формул (5) и (6). Поскольку класс потенциалов, для которых формула (5) справедлива, не указан, эти примеры можно рассматривать в качестве численных экспериментов.

Вначале используем модель, в которой пропагатор (2) и матрица плотности (1) могут быть найдены в явной форме. Таким образом, имеется возможность сравнивать результаты приближенных вычислений с точным решением. Струнц [2] получил выражение (2) для пропагатора из уравнения для оператора плотности

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2\hbar} \sum_{\mu} \left([\hat{L}_{\mu} \hat{\rho}, \hat{L}_{\mu}^{\dagger}] + [\hat{L}_{\mu}, \hat{\rho} \hat{L}_{\mu}^{\dagger}] \right).$$

Здесь \hat{H} - гамильтониан квантовой системы; взаимодействие этой системы со средой моделируется посредством операторов \hat{L}_{μ} . Как показал Линдблад [15], это уравнение является наиболее общей формой мастер-уравнения для ОКС марковского типа, к которым относятся многие встречающиеся в приложениях квантовые системы. Для операторов $\hat{L}_{\mu} = \beta_{\mu} \hat{x} + \gamma_{\mu} \hat{p}$, где β_{μ} и γ_{μ} - комплексные числа, \hat{x} и \hat{p} - соответственно операторы координаты и импульса квантовой частицы, имеющей одну степень свободы, Струнц получил следующее выражение для функционала влияния среды

$$F_{infl}[x(\tau), x'(\tau)] = \exp(\Gamma t) \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} D[x(\tau), x'(\tau)]^2 \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi[x(\tau), x'(\tau)] \right\}, \quad (7)$$

где

$$\Phi[x(\tau), x'(\tau)] = m\Gamma \int_0^t d\tau (\dot{x}(\tau)x'(\tau) - x(\tau)\dot{x}'(\tau)) - \frac{1}{2}m\Gamma^2 \int_0^t d\tau (x^2(\tau) - x'^2(\tau)),$$

$$D[x(\tau), x'(\tau)]^2 = \left(|\beta|^2 + m^2|\gamma|^2\Gamma^2 - 2m\bar{\omega}\Gamma \right) \int_0^t d\tau (x(\tau) - x'(\tau))^2$$

$$+ 2m(\bar{\omega} - m|\gamma|^2\Gamma) \int_0^t d\tau (x(\tau) - x'(\tau))(\dot{x}(\tau) - \dot{x}'(\tau))$$

$$+ m^2|\gamma|^2 \int_0^t d\tau (\dot{x}(\tau) - \dot{x}'(\tau))^2,$$

$$|\beta|^2 = \sum_{\mu} |\beta_{\mu}|^2, \quad |\gamma|^2 = \sum_{\mu} |\gamma_{\mu}|^2, \quad \bar{\omega} - i\Gamma = \sum_{\mu} \beta_{\mu} \gamma_{\mu}^*.$$

Диссипация энергии в ОКС определяется параметром Γ , $|\beta|^2$ и $|\gamma|^2$ являются коэффициентами диффузии соответственно по импульсу и координате.

Непосредственное применение формулы (6) для вычисления интеграла (5) с функционалом влияния (7) оказалось невозможным из-за наличия в нем члена $m^2|\gamma|^2 \times \int_0^t d\tau (\dot{x}(\tau) - \dot{x}'(\tau))^2$. Замена функций $\dot{x}(\tau)$ и $\dot{x}'(\tau)$ приближенными выражениями из (6) приводит в этом случае к расходящемуся интегралу от квадрата δ -функции. Попытка положить равным нулю коэффициент $|\gamma|^2$ перед расходящимся членом приводит к нарушению соотношений $|\beta|^2 > 0$, $|\gamma|^2 > 0$, $|\beta|^2|\gamma|^2 - \bar{\omega}^2 \geq \Gamma^2\hbar^2/8$, которые являются условиями сохранения неотрицательности матрицы плотности в каждый момент времени [16],[17]. Возможность вычисления интегралов от функционалов такого вида остается нерешенной проблемой этого подхода. Модели с $|\gamma|^2 = 0$ по своему характеру являются скорее классическими, однако в некоторых случаях могут использоваться для описания квантовых явлений [18]. Такие модели успешно применяются, например, в ядерной физике [19]. Выражение (7) для функционала F_{infl} с $|\gamma|^2 = \bar{\omega} = 0$ будет использоваться в дальнейших вычислениях в этой работе.

На основе результатов Струнца в работе [20] было получено явное выражение для диагональных элементов матрицы плотности для частицы с начальным состоянием

$$\Psi(x) = (2\pi\xi(0))^{-1/4} \exp \left\{ -\frac{(x - \bar{x}(0))^2}{4\xi(0)} + \frac{i}{\hbar} \bar{p}(0)x \right\}, \quad (8)$$

движущейся в потенциале $V(x) = -m\omega^2 x^2/2$:

$$\rho(x, t) = \langle x | \hat{\rho}(t) | x \rangle = (2\pi\xi(t))^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{(x - \bar{x}(t))^2}{2\xi(t)} \right\}. \quad (9)$$

Для $\bar{x}(0) = \bar{p}(0) = 0$ первый момент $\bar{x}(t)$ в этом гауссиане равен нулю, второй момент при $|\gamma|^2 = \bar{\omega} = 0$ имеет вид ¹

$$\xi(t) = \frac{\hbar|\beta|^2}{4m^2\Gamma(\Gamma^2 - \omega^2)} + \frac{1}{2}e^{-2\Gamma t} \left\{ \xi(0) - \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2\xi(0)} + \frac{\hbar|\beta|^2}{2m^2\omega^2\Gamma} + \left(\xi(0) + \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2\xi(0)} + \frac{\hbar|\beta|^2\Gamma}{2m^2\omega^2(\omega^2 - \Gamma^2)} \right) \cosh(2\omega t) + \frac{\hbar|\beta|^2}{2m^2\omega(\omega^2 - \Gamma^2)} \sinh(2\omega t) \right\}. \quad (10)$$

На рис. 1 показана функция $\rho(x, t)$, рассчитанная для различных моментов времени по формулам (1),(5),(6) и (7) с начальным условием (8). Интегрирование по пространству R^2 в формуле (1) заменялось численным интегрированием по прямоугольнику, который выбирался таким образом, чтобы неучитываемая часть интеграла была пренебрежимо мала для каждого момента времени. Аналогично пространство интегрирования R^N в правой части формулы (6) заменялось конечным N -мерным параллелепипедом, выбранным из условия малости неучитываемой части интеграла для любых значений параметров, содержащихся в функционале $F[x(\tau), x'(\tau)]$. Поскольку этот функционал содержит в себе потенциал $V(x)$ и функционал влияния F_{infl} , от их вида зависит скорость убывания подынтегральной функции при стремлении переменных $u_1^{(1)}, \dots, u_{k_1}^{(1)}, \dots, u_1^{(l)}, \dots, u_{k_l}^{(l)}$ к бесконечности.

¹В работе [20] используются параметры D_{pp} , λ_p , λ_q и σ_{qq} , которые связаны с параметрами $|\beta|^2$, Γ и ξ равенствами $D_{pp} = \hbar|\beta|^2/2$, $\lambda_p + \lambda_q = 2\Gamma$, $\sigma_{qq} = \xi$.

Рассмотрим потенциал вида $V(x) = ax^4 - bx^2$, $a, b > 0$. В этом случае для пропагатора и матрицы плотности нет явных выражений, однако можно сравнить результаты, полученные с помощью разных численных методов. На рис. 2 показана функция $\rho(x, t)$, вычисленная с помощью описанного в этой работе подхода. Для сравнения приведены соответствующие результаты, полученные методом разложения матрицы плотности по базису из собственных функций гармонического осциллятора с последующим решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений [21].

В приведенных примерах для приближенного вычисления функционального интеграла в формуле (5) использовалась формула (6) с минимальной кратностью аппроксимирующих римановых интегралов ($k_1 = k_2 = 1$). В итоге для нахождения матрицы плотности потребовалось вычислить обычный (риманов) интеграл кратности 5.

4 Итерационный метод вычислений

Поскольку параметры, характеризующие исследуемую физическую систему, а также параметры пропагатора x_0, x'_0, x, x' и t входят в интегрируемый функционал, от их значений зависит погрешность формулы (6) при фиксированных значениях k_1 и k_2 . Как видно из рис. 1 и 2, для заданных значений физических параметров и временных интервалов достигнута хорошая точность вычислений. Их изменение может привести к тому, что погрешность приближенных вычислений окажется большой. Для уменьшения погрешности можно увеличивать значения k_1 и k_2 в формуле (6). В этом разделе описан способ нахождения матрицы плотности, который также позволяет уменьшать погрешность вычислений.

Разделим общий отрезок времени $[0, t]$ на n частей $[0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{p-1}, t], 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t$. Согласно формуле (1) для каждого из отрезков $[t_{j-1}, t_j]$ можно записать

$$\langle x_j | \hat{\rho}(t_j) | x'_j \rangle = \int dx_{j-1} \int dx'_{j-1} J(x_j, x'_j, t_j; x_{j-1}, x'_{j-1}, t_{j-1}) \langle x_{j-1} | \hat{\rho}(t_{j-1}) | x'_{j-1} \rangle. \quad (11)$$

$j = 1, \dots, n, t_n = t, x_n = x, x'_n = x'$. Таким образом, имеется итерационная процедура, в которой матрица плотности для некоторого момента времени выражается через матрицу плотности для некоторого предыдущего момента времени и не зависит от более ранних моментов. Это означает, что пропагатор $J(x_j, x'_j, t_j; x_{j-1}, x'_{j-1}, t_{j-1})$ зависит от разности $t_j - t_{j-1}$, т.е. $J(x_j, x'_j, t_j; x_{j-1}, x'_{j-1}, t_{j-1}) = J(x_j, x'_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, x'_{j-1}, 0)$. Для нахождения функции $\langle x | \hat{\rho}(t) | x' \rangle$ по формуле (11) необходимо последовательно вычислить n двукратных интегралов по переменным $x_0, x'_0, \dots, x_{n-1}, x'_{n-1}$, что равносильно вычислению $\langle x | \hat{\rho}(t) | x' \rangle$ по формуле (1), в которой пропагатор J представлен в виде интеграла кратности $2n - 2$:

$$J(x, x', t; x_0, x'_0, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} J(x, x', t - t_{n-1}; x_{n-1}, x'_{n-1}, 0) \times \quad (12)$$

$$J(x_{n-1}, x'_{n-1}, t_{n-1} - t_{n-2}; x_{n-2}, x'_{n-2}, 0) \dots J(x_1, x'_1, t_1; x_0, x'_0, 0) dx_1 dx'_1 \dots dx_{n-1} dx'_{n-1}.$$

Отрезки $[t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, \dots, n$, можно выбирать таким образом, чтобы точность вычисления пропагаторов $J(x_j, x'_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, x'_{j-1}, 0)$ по формуле (6) с некоторыми n_1 и n_2 оставалась высокой на каждом из этих отрезков. С другой стороны, с ростом n

возрастает погрешность, связанная с приближенным интегрированием по переменным $x_1, x'_1, \dots, x_{n-1}, x'_{n-1}$, которая включает в себя погрешность от замены пространства интегрирования R^{2n-2} некоторой ограниченной областью. Для определения границ этой области необходимо учитывать динамику изменения искомой матрицы плотности. При итерационном способе вычислений область интегрирования по x_j, x'_j можно приблизительно определить по результатам вычисления матрицы плотности, полученной при интегрировании по x_{j-1}, x'_{j-1} . Оптимальный выбор точек t_1, \dots, t_{n-1} , а также параметров k_1 и k_2 зависит от физических характеристик рассматриваемых процессов и от интервалов времени, на которых исследуется их эволюция.

На рис. 3 показаны результаты вычислений функции $\rho(x, t)$ для потенциала $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, которые проводились с применением формулы (12). Для начального условия (8) точный ответ в этом случае записывается в виде гауссиана (9), в котором выражение для дисперсии можно получить из формулы (10) путем замены ω на $i\omega$:

$$\xi(t) = \frac{\hbar|\beta|^2}{4m^2\Gamma(\Gamma^2 + \omega^2)} + \frac{1}{2}e^{-2\Gamma t} \left\{ \xi(0) + \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2\xi(0)} - \frac{\hbar|\beta|^2}{2m^2\omega^2\Gamma} + \left(\xi(0) - \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2\xi(0)} + \frac{\hbar|\beta|^2\Gamma}{2m^2\omega^2(\omega^2 + \Gamma^2)} \right) \cos(2\omega t) - \frac{\hbar|\beta|^2}{2m^2\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \sin(2\omega t) \right\}. \quad (13)$$

5 Заключение

Границы применимости описанного в этой работе подхода могут определиться только в процессе его использования в различных областях квантовой физики. Тем не менее, можно указать некоторые характерные особенности этого подхода.

Вычисление пропагатора $J(x, x', t; x_0, x'_0, 0)$ по приближенной формуле (6) не связано с дискретизацией пространства независимых переменных x, x' и t , видоизменением заданного потенциала или ограничением области изменения пространственных переменных x и x' . С практической точки зрения эта область ограничивается погрешностью численного нахождения пропагатора J при больших $|x|, |x'|$ и t . Это позволяет решать задачу в постановке, близкой к исходной, если погрешность, связанная с ограничением бесконечной области интегрирования по x_0 и x'_0 в формуле (1), достаточно мала. Кроме простоты практического применения метода, такая особенность может иметь большое значение в случаях, когда пространственная область определения приближенного выражения для матрицы плотности быстро меняется со временем. Это часто имеет место, если начальное условие $\langle x_0 | \hat{\rho}(t_0) | x'_0 \rangle$ представляет собой очень узкий пик или содержит такие пики. При заданном положении этих пиков численное интегрирование по x и x' в формуле (1) является относительно несложной задачей. Как видно из рассмотренного в разделе 3 примера приближенного вычисления функции $\rho(x, t)$, в котором в качестве начального условия был выбран гауссиан с дисперсией $\xi = 10^{-6}$, хорошая точность вычислений может быть достигнута за счет подходящего выбора области изменения переменных x_0 и x'_0 и сетки численного интегрирования.

В приведенных в этой работе примерах вычисление матрицы плотности свелось к вычислению римановых интегралов относительно небольшой кратности, которое может выполняться с помощью различных численных методов [22]-[25]. Как показано в работах [12],[26], с помощью формулы, точной для функционалов определенного

вида, кратные функциональные интегралы по мере Винера также могут хорошо аппроксимироваться римановыми интегралами небольшой кратности. Это указывает на возможность применения предлагаемого подхода в случае многомерных задач.

Кроме вычислительных аспектов, в этой работе затрагиваются также некоторые вопросы математики и физики, каждый из которых может быть предметом отдельного исследования. Примеры вычисления матрицы плотности, а также приведенные выше соображения позволяют надеяться, что приближенное интегрирование в функциональных пространствах станет эффективным методом исследования временной эволюции открытых квантовых систем и что соответствующая теоретическая база будет впоследствии развита.

Благодарности

Авторы признательны доктору физ.-мат. наук В.В.Волкову, кандидатам физ.-мат. наук Г.Г.Адамяну, Н.В.Антоненко и Ю.В.Пальчикову, которые предложили физическую постановку задачи, за плодотворные обсуждения и предоставленные результаты расчетов матрицы плотности, полученные с помощью используемого ими численного метода.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 02-01-81023, 01-01-00726

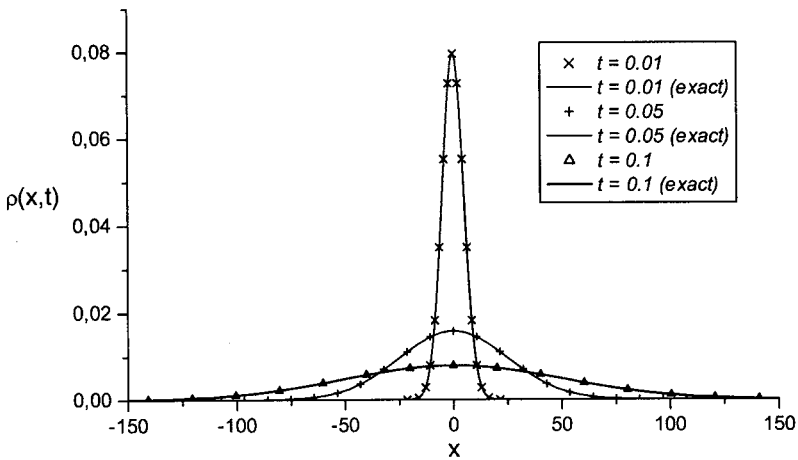


Рис. 1. Функция $\rho(x,t)$, вычисленная для различных моментов времени t по формулам (1),(5),(6),(7) и (8) с потенциалом $V(x) = -m\omega^2 x^2/2$ и параметрами $m = \omega = \hbar = 1$, $|\gamma|^2 = \bar{\omega} = \Gamma = 0$, $|\beta|^2 = 1$, $\bar{x}(0) = \bar{p}(0) = 0$, $\xi(0) = 10^{-6}$. Соответствующие точные решения, полученные по формулам (9) и (10), показаны сплошными линиями

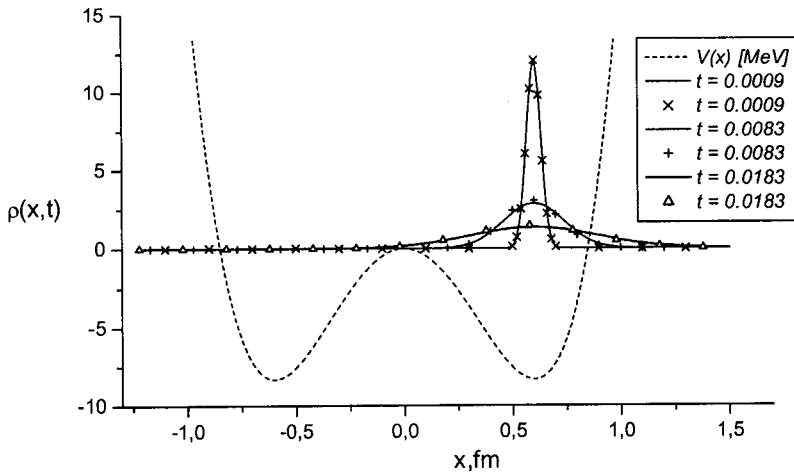


Рис. 2. Функция $\rho(x,t)$, вычисленная для различных моментов времени t по формулам (1),(5),(7),(6) и (8) с потенциалом $V(x) = 64,286 x^4 - 46,286 x^2$ и параметрами $m = 44m_0$, m_0 - масса нуклона, $|\gamma|^2 = \bar{\omega} = 0$, $\hbar\Gamma = 2$ МэВ, $\hbar\omega = 0,22$ МэВ, $|\beta|^2 = \Gamma m\omega$ [20], $\bar{x}(0) = 0,6$ фм, $\bar{p}(0) = 0$, $\xi(0) = 0,0009$ фм². Время измеряется в единицах $6,6 \times 10^{-22}$ с. Соответствующие результаты, полученные с помощью другого приближенного метода [21], показаны сплошными линиями

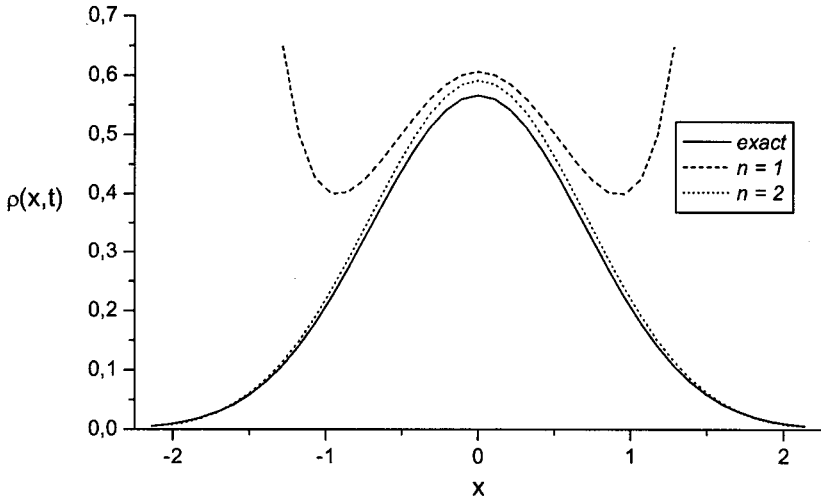


Рис. 3. Функция $\rho(x, t)$, вычисленная для момента времени $t = 1$ по формулам (1),(5),(6), (7) и (8) с потенциалом $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ и параметрами $m = 53m_0$, m_0 - масса нуклона, $|\gamma|^2 = \bar{\omega} = 0$, $\hbar\Gamma = 1\text{МэВ}$, $\hbar\omega = 2\text{МэВ}$, $|\beta|^2 = \Gamma m\omega$ [20], $\bar{x}(0) = \bar{p}(0) = 0$, $\xi(0) = 0.01\text{фм}^2$. Время измеряется в единицах $6.6 \times 10^{-22}\text{сек}$. Пропагатор (5) вычислялся по формуле (12) при $n = 1$ и $n = 2$ с промежуточной точкой $t_1 = 0.4$. Точное решение, полученное по формулам (9) и (10), показано сплошной линией

Литература

- [1] Feynman R.P. and Vernon F.L. *Ann. Phys.* **24** (1963) 118-173.
- [2] Strunz W.T. *J. Phys. A* **30** (1997) 4053-4064.
- [3] Feynman R.H. and Hibbs A.R. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York: McGraw-Hill, 1965).
- [4] Caldeira A.O. and Laggett A.J. *Physica A* **121** (1983) 587-616.
- [5] Grabert H. et al. *Phys. Rep.* **168** (1988) 115-207.
- [6] Weiss U. *Quantum Dissipative Systems* (Singapore: World Scientific, 1993).
- [7] Exner P. *Open Quantum Systems and Feynman Integrals* (Holland: D.Reidel Publishing Company, 1985).
- [8] Haba Z. *J. Phys. A* **27** (1994) 6457-6477.
- [9] Егоров А.Д., Соболевский П.И., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов (Минск, Наука и техника, 1985); Egorov A.D., Sobolevsky P.I. and Yanovich L.A. *Functional Integrals: Approximate Evaluation and Applications* (Dordrecht: Kluwer, 1993).
- [10] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. *Мат. моделирование*, т.1, вып.8, (1989), с.139-157.
- [11] Lobanov Yu.Yu. et al., *J. Comput. Appl. Math.* **70** (1996) 145-160; Lobanov Yu.Yu. *Comp. Phys. Comm.* **99** (1996) 59-72; Lobanov Yu.Yu. *J. Phys. A* **29** (1996) 6653-6669.
- [12] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю. *ЭЧАЯ*, т.27, вып.1, (1996), с.173-242
- [13] Cameron R.H. *J. Math. and Phys.* **39** (1960) 126-140.
- [14] Рушай В.Д. ОИЯИ, P11-2003-113, Дубна, 2003.
- [15] Lindblad G. *Commun. Math. Phys.* **48** (1976) 119-130.
- [16] Dodonov V.V., Man'ko V.I., Man'ko O.V. *Reports of Physical Institute* **191** (1989) с.171.
- [17] Isar A. et al., *Int. J. Mod. Phys. A* **3** (1994) 635.
- [18] Adamian G.G., Antonenko N.V., Scheid W. *Ядерная физика* **62** (1999) 1420-1430.
- [19] Munro W.J. and Gardiner C.W., *Phys. Rev. A* **53** (1996) 2633.
- [20] Adamian G.G., Antonenko N.V., Scheid W. *Phys. Lett. A* **244** (1998) 482-488.
- [21] Adamian G.G., Antonenko N.V., Scheid W. *Nucl. Phys. A* v.645, N.3, (1999) 376-398.
- [22] Коробов Н.М. Теоретико-числовые методы в приближенном анализе (Москва, Физматгиз, 1963).
- [23] Соболев С.Л., Васкевич В.Л. Кубатурные формулы (Новосибирск, Изд-во ин-та математики, 1996).
- [24] Evans M., Swartz T. *Approximating Integrals Via Monte Carlo and Deterministic Methods* (Oxford University Press, 2000).
- [25] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Рушай В.Д. ОИЯИ, P11-95-505, Дубна, 1995.
- [26] Lobanov Yu.Yu., Shahbagian R.R., Zhidkov E.P. *JINR*, E11-91-353, Dubna, 1991; *Мат. моделирование*, т.5, вып.12, (1993), с.61-78.

Жидков Е. П., Лобанов Ю. Ю., Рушай В. Д.

P11-2003-114

Численное исследование открытых квантовых систем
методом приближенного функционального интегрирования
по условной мере Винера

Получено выражение пропагатора для открытых квантовых систем в форме двойного функционального интеграла по условной мере Винера. Это позволяет применять развитые ранее методы приближенного вычисления интегралов Винера для численного исследования временной эволюции таких систем. Применимость полученной формулы, а также эффективность используемого приближенного метода проверяется на некоторых примерах. Предложена процедура, позволяющая повышать точность вычислений.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

Zhidkov E. P., Lobanov Yu. Yu., Rushai V. D.

P11-2003-114

Numerical Study of Open Quantum Systems
by the Method of Approximate Functional Integration
with Respect to Conditional Wiener Measure

Representation of propagator for open quantum systems in the form of a double functional integral with respect to the conditional Wiener measure is obtained. Numerical methods of calculation of Wiener integrals can now be applied to study time evolution of these systems. Applicability of the obtained formula as well as efficiency of the used numerical method are examined. A method which allows one to improve the results of numerical calculations is given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Е. В. Сабанеевой*

Подписано в печать 08.07.2003.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,81. Уч.-изд. л. 1,14. Тираж 310 экз. Заказ № 54007.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/