

В.Н. Иванов, И.В. Иванов

## Тепловое излучение системы слабосвязанных осцилляторов, испытывающих перманентное стохастическое возмущение

*Омский государственный технический университет*

Поступила в редакцию 24.10.2005 г.

Рассматривается влияние обратной связи взаимодействующих с окружающей средой осцилляторов на заселенность их квантовых состояний и тепловое излучение. Самовоздействие осцилляторов моделируется с помощью нелинейного оператора в уравнении Шредингера. Показано, что при наличии перманентного стохастического возмущения наиболее вероятными являются собственные стационарные состояния осцилляторов, причем изменение квантовых состояний возможно только скачком. При температуре ниже  $T = \hbar\omega/(2k)$  ( $\omega$  – частота колебаний осциллятора;  $k$  – постоянная Больцмана) имеет место Бозе-конденсация квантовых состояний осцилляторов. Проведенное численное моделирование показывает, что при более высокой температуре распределение вероятности заселенности энергетических уровней осцилляторов, взаимодействующих с окружающей средой, довольно близко к распределению Больцмана. При относительно низких температурах излучение обусловлено в основном квантовыми переходами между ближайшими уровнями. При повышении температуры максимум энергии излучения осцилляторов смещается в коротковолновую часть спектра.

### Введение

Квантовый осциллятор – хорошо изученный объект, используемый для описания колебаний, возникающих в физических системах. В реальных системах осцилляторы обычно являются частью сложных образований типа кластеров или ван-дер-ваальсовых молекул, имеющих большое сечение столкновений, что приводит к их перманентному стохастическому возмущению. Такое же стохастическое возмущение любая квантовая система испытывает из-за взаимодействия с вакуумным состоянием электромагнитного поля. Поэтому при описании состояний квантовых осцилляторов часто возникает необходимость в учете этого перманентного возмущения. Это можно сделать, перейдя от уравнения Неймана для статистического оператора сложной системы к уравнению для матрицы плотности одного выделенного осциллятора.

Однако при такой редукции возникает необходимость в априорном задании интеграла столкновений на основе какой-либо модели взаимодействия осциллятора с окружением, что в ряде случаев при написании кинетических уравнений может приводить к искажению информации о физической системе. Кроме того, такой подход из-за необходимости учета относительно большого числа дифференциальных уравнений, пропорционального квадрату числа принимаемых во внимание энергетических уровней, имеет ограниченные аналитические возможности. В этой связи желательно построение такой схемы описания состояний возмущенных квантовых осцилляторов, в которой сохранялись

бы вычислительные возможности уравнения Шредингера. Но волновые функции при этом должны определяться так, чтобы средние значения физических величин, определяемые с их помощью, были бы близки к значениям, полученным с помощью формализма матрицы плотности.

В данной статье рассматривается один из возможных подходов к решению этой задачи. В этом подходе [1–3] состояние выделенной подсистемы, взаимодействующей с окружением, описывается эффективной волновой функцией, усредненной по влиянию окружающей среды. Такие эффективные функции – результат решения соответствующим образом построенного нелинейного уравнения Шредингера.

### Уравнение Шредингера для квантовой подсистемы, испытывающей перманентное стохастическое возмущение

Построение уравнения Шредингера для эффективных волновых функций осуществляется с помощью метода Фейнмана [4], который является одним из способов описания распространения волн в среде. В нем  $\psi$ -функция (волновая поверхность) рассматривается как источник вторичных волн. Каждая вторичная волна  $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$  (пропагатор), которую записывают как континуальный интеграл

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, t + \tau, t)\right) D\mathbf{r}(t), \quad (1)$$

представляет собой сумму по всем возможным путям, соединяющим начальную и конечные точки. В (1)  $S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, t + \tau, t)$  — классическое действие, вычисленное вдоль пути, соединяющего точки  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}$ ;  $t$  — начальный, а  $t + \tau$  — конечный момент времени;  $A$  — амплитуда. При таком задании пропагатора для него справедливо правило группового умножения:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) K(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d^3 \mathbf{r}_2, \quad (2)$$

которое позволяет записать для волновой функции выделенной подсистемы интегральное уравнение, эквивалентное уравнению Шредингера [4]:

$$\psi(\mathbf{r}, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, t + \tau, t)\right) \psi(\mathbf{r}_1, t) D\mathbf{r}(t) d^3 \mathbf{r}_1. \quad (3)$$

В методе Фейнмана каждая возможная траектория — это случайная ломаная линия, реализация которой обусловлена квантовыми флуктуациями. Присутствие в (3) континуального интеграла позволяет естественно ввести в число причин, влияющих на вид траектории, перманентное стохастическое возмущение выделенной подсистемы. Действительно, если формально рассматривать каждую альтернативную траекторию, начинающуюся в  $\mathbf{r}_1$  и заканчивающуюся в  $\mathbf{r}$ , как результат броуновского движения, то возмущающие факторы можно учесть с помощью функции

$$W\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{U}, \frac{\tau}{2}\right) = C \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2}{2p\beta^{-2}\tau} + \frac{((\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{U}_0)}{2p\beta^{-2}} - \frac{\mathbf{U}_0^2 \tau}{8p\beta^{-2}}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{\mathbf{U}^2}{2p\beta^{-1}} + \frac{\left[\mathbf{U} \cdot \left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 - \mathbf{U}_0 \frac{\tau}{2}\right)\right]}{p\beta^{-1}\tau}\right), \quad (4)$$

являющейся решением уравнения Фоккера—Планка [5]. Эта функция  $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{U}, \tau/2)$  определяет совместное распределение вероятности найти в момент времени  $\tau/2$  (предполагается, что это время значительно меньше характерных времен изменения регулярного по времени возмущения квантовой подсистемы) имеющую ту или иную скорость броуновскую частицу в заданной точке пространства. В (4)  $C$  — нормировочная константа;  $p = \beta k T^*/m$ , где  $m$  — масса частицы, участвующей в броуновском движении;  $k$  — постоянная Больцмана,  $T^*$  — эффективная температура окружающей среды. Если основным фактором, определяющим вид траекторий, являются столкновения с окружением, то  $T^*$  совпадает с обычной температурой. Параметр  $\beta$  — «вязкость» окружающей среды. В дальнейшем будем полагать, что  $\beta$  может меняться только адиабатически. Вектор  $\mathbf{U}_0$  по своему физическому смыслу

— скорость упорядоченного движения броуновской частицы в окружающей среде: в случае обычной диффузии  $\mathbf{U}_0 \frac{\tau}{2}$  соответствует центральному моменту гауссовской функции распределения.

Распределение (4) позволяет определить с точностью до множителя вклад в итоговую  $\psi$ -функцию траекторий, начавшихся в момент времени  $t$  в  $\mathbf{r}_1$  и закончившихся в близкий момент времени  $t + \tau$  в точке  $\mathbf{r}$ :

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar} L\left(\mathbf{r}_1 + \mathbf{U} \frac{\tau}{2}, \mathbf{U}, t + \frac{\tau}{2}\right) \tau\right] \times \\ \times W\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{U}, \frac{\tau}{2}\right) d^3 \mathbf{U}. \quad (5)$$

В (5) действие заменено согласно стандартному алгоритму [4] произведением среднего на промежутке времени  $\tau$  лагранжиана  $L(\mathbf{r}, \mathbf{U}, t)$  на временной интервал.

Представление пропагатора в виде (5) и усреднение  $A \exp\left[\frac{i}{\hbar} L\left(\mathbf{r}_1 + \mathbf{U} \frac{\tau}{2}, \mathbf{U}, t + \frac{\tau}{2}\right) \tau\right]$  по всем возможным значениям скорости, по сути, эквивалентны функциональному интегрированию в (3). Причем если интегрирование по скорости не нарушает групповые свойства (2), то уравнение (3) автоматически переходит в интегральное уравнение для эффективных, усредненных по влиянию окружающей среды волновых функций выделенной подсистемы:

$$\psi(\mathbf{r}, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1, t) d^3 \mathbf{r}_1. \quad (6)$$

Конкретный вид пропагатора в (6) определяется формой лагранжиана. В рассматриваемом случае этот лагранжиан имеет две особенности. Во-первых, в нем можно не указывать явный вид стохастического слагаемого, так как в окончательном выражении для действия оно исчезает. Действительно, если  $\tau$  значительно больше длительности флуктуаций стохастического возмущения, то для действия справедливо

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \int_t^{t+\tau} L(\mathbf{r}, \mathbf{U}, t_1) dt_1 = \int_t^{t+\tau} (\tilde{T} - V(t_1) - \tilde{V}(t_1)) dt_1 = \\ = \int_t^{t+\tau} (\tilde{T} - V(t_1)) dt_1,$$

где  $\tilde{T}$  — кинетическая, а  $V(t) + \tilde{V}(t)$  — потенциальная энергия подсистемы;  $V(t)$  включает в себя все регулярные по времени слагаемые, а  $\tilde{V}(t)$  — стохастическое возмущение. Во-вторых, в лагранжиан помимо стандартных слагаемых должно входить выражение, обеспечивающее сохранение во времени нормировки эффективной волновой функции. Учитывая, что лагранжиан определяется с точностью до полной производной от любой функции координат и времени [6], будем полагать, что в общем

случае это слагаемое может оказаться функционалом волновой функции  $\Phi(\psi)$ .

Тогда

$$L\left(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{U}\tau}{2}, \mathbf{U}, t + \frac{\tau}{2}\right) = \frac{m\mathbf{U}^2}{2} - q\varphi\left(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{U}\tau}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) + \frac{q}{c}\left[\mathbf{U} \cdot \mathbf{A}\left(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{U}\tau}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right)\right] - \Phi(\psi), \quad (7)$$

где  $m$  и  $q$  — масса и заряд, характеризующие подсистему;  $c$  — скорость света,  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  — скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля.

Подстановка (7) в (5) приводит к следующему выражению для пропатора:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = B_1 \exp\left\{i\frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2}{2\hbar\tau}(1 + i\alpha) + i\frac{q}{\hbar c}\left[\mathbf{r} + \mathbf{r}_1\right] \cdot \left[\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}_1}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) - \frac{mc}{2q}(1 + i\alpha)\mathbf{U}_0\right]\right\} - i\frac{q}{\hbar}\left[\varphi\left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}_1}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) + \frac{1}{2c}\left[\mathbf{U}_0 \cdot \mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}_1}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right)\right] - \frac{m}{8}(1 + i\alpha)\mathbf{U}_0^2\right]\tau - \chi\frac{m}{\hbar^2}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2 - i\frac{\tau}{\hbar}\Phi(\psi)\}, \quad (8)$$

где  $B_1$  — постоянная;  $\alpha = \hbar\beta/(kT^*)$ ,  $\chi = kT^*/2$ .

Пропатор (8) удовлетворяет условию (2) и, следовательно, может быть использован для нахождения эффективных волновых функций.

Переход от интегрального уравнения (6) к уравнению Шредингера осуществляется с помощью стандартного алгоритма Фейнмана. Правая часть уравнения (6) [пропатор определяется формулой (8)] интерпретируется как интегродифференциальный оператор, действующий на  $\psi(\mathbf{r}, t + \tau)$ . Предполагается, что этот оператор с точностью до  $O(\tau^2)$  является единичным. Это возможно только при действии его на функции, удовлетворяющие дифференциальному уравнению Шредингера [4]. В данном случае указанный оператор ведет себя как единичный при действии на функции, удовлетворяющие уравнению:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha}\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} - (1-i\alpha)\frac{m\tilde{\mathbf{U}}_0}{2}\right)^2 + \chi\right]\psi + q\left[\varphi - \frac{(\mathbf{A} \cdot \tilde{\mathbf{U}}_0)}{2c} - (1+i\alpha)\frac{m\tilde{\mathbf{U}}_0^2}{8q}\right]\psi + \Phi(\psi)\psi, \quad (9)$$

где  $\hat{\mathbf{P}}$  — оператор импульса.

Это уравнение Шредингера, записанное для эффективных волновых функций, в общем случае из-за наличия в нем функционала  $\Phi(\psi)$  является нелинейным. Величина  $\tilde{\mathbf{U}}_0 = -\mathbf{U}_0$  в (9) определяет скорость перемещения окружающей среды относительно выделенной квантовой подсистемы; в исследуемом случае эта скорость равна нулю. По по-

строению  $\psi$ -функции, удовлетворяющие полученному уравнению Шредингера, соответствуют состояниям подсистемы, усредненным по влиянию окружения. В [7] показано, что при  $\Phi(\psi) = 0$  и  $\tilde{\mathbf{U}}_0 = 0$  из (9) для статистического оператора  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  следует такое же по форме уравнение Неймана, что и для выделенной по методу Лэкса [8] матрицы плотности подсистемы при редукции матрицы плотности сложной системы, в которой вторая подсистема ведет себя как марковский термостат.

Стандартное унитарное преобразование [9] приводит (9) к виду, справедливому в дипольном приближении:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha}\left(\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2 + \chi\right)\psi + q\varphi\psi + \Phi(\psi)\psi - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{d})\psi, \quad (10)$$

где  $\mathbf{E}$  — напряженность внешнего электрического поля;  $\mathbf{d}$  — дипольный момент квантовой подсистемы.

Чтобы записать явный вид функционала  $\Phi(\psi)$ , выделим в (10) эффективный оператор возмущения подсистемы окружающей средой (слагаемое в гамильтониане, исчезающее при  $\alpha \rightarrow 0$ ):

$$\hat{V} = -\frac{i\alpha}{1+\alpha^2}\left(\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2 + \chi\right) + \Phi(\psi). \quad (11)$$

Поскольку осцилляторы представляют собой стабильные образования, их волновые функции должны сохранять нормировку во времени. Следовательно, оператор (11) должен быть [10] эрмитовым. Тогда матричные элементы функционала  $\Phi(\psi)$  удовлетворяют равенству

$$\langle\psi|\Phi(\psi)|\psi\rangle - \langle\psi|\Phi^*(\psi)|\psi\rangle = \frac{2i\alpha}{1+\alpha^2}\langle\psi|\left(\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2 + \chi\right)|\psi\rangle. \quad (12)$$

Действительная часть матричных элементов  $\langle\psi|\Phi(\psi)|\psi\rangle$  — это энергия взаимодействия подсистемы с окружающей средой. В рамках рассматриваемой модели взаимодействия выделенной подсистемы с окружением она обусловлена стохастическим возмущением и в случае термодинамического равновесия подсистемы с окружением ее величина должна быть близка к нулю.

Соотношение (12) всегда выполняется, если функционал  $\Phi(\psi)$  имеет вид

$$\Phi(\psi) = \frac{i\alpha}{1+\alpha^2}\langle\psi|\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2 + \chi|\psi\rangle. \quad (13)$$

Отметим, что при такой форме функционала часть решений  $\psi(\mathbf{r}, t)$  уравнения (10) при  $\Phi(\psi) \neq 0$  можно выразить через волновые функции  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$ , являющиеся решением этого же уравнения при  $\Phi(\psi) = 0$  [2]:

$$\psi = \frac{\tilde{\psi}}{\sqrt{\langle\tilde{\psi}|\tilde{\psi}\rangle}} = \sum_n C_n(t)\psi_n(\mathbf{r}). \quad (14)$$

В (14)  $C_n(t)$  — регулярные в математическом смысле функции времени, а  $\psi_n(\mathbf{r})$  — собственные функции стационарного уравнения Шредингера:

$$E_n \psi_n = \frac{1}{1+i\alpha} \left( \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 + \chi \right) \psi_n + q\Phi \psi_n = \frac{1}{1+i\alpha} (\hat{T} + \chi) \psi_n + U \psi_n, \quad (15)$$

где  $E_n$  – константа разделения.

Нелинейность уравнения (10) – естественное следствие редукции задачи о сложной системе (выделенная подсистема и окружение), относится к задаче о состоянии только подсистемы. Функционал (13) можно интерпретировать как слагаемое, учитывающее обратную связь, т.е. самовоздействие выделенной подсистемы через окружающую среду. Подстановка функционала (13) в (9) приводит в уравнении Шредингера для эффективных волновых функций к гамильтониану, совпадающему по структуре с гамильтонианом, который в стационарном случае записывают при изучении молекул, взаимодействующих с окружением [11]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda_1 \hat{A} \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle,$$

где  $\hat{H}_0$  – гамильтониан изолированной молекулы;  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  – операторы, выбор явного вида которых зависит от принятой модели взаимодействия молекулы с окружением;  $\lambda_1$  – параметр, характеризующий интенсивность взаимодействия.

В силу нелинейности уравнения (10) среди его решений существуют и такие, у которых коэффициенты  $C_n(t)$  в суперпозиции

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\mathbf{r}) \quad (16)$$

являются нерегулярными функциями времени [3, 8]. В частности, это может иметь место в отсутствие регулярного во времени возмущения при флуктуациях параметра  $\alpha$ . Эти «дополнительные» решения определяют заселенность квантовых уровней.

Для того чтобы при  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0$  (16) являлось решением нелинейного уравнения (10), достаточно, чтобы коэффициенты  $C_n(t)$  удовлетворяли дифференциальным уравнениям:

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = E_n C_n + \frac{i\alpha}{1+\alpha^2} C_n \sum_{m,k} C_m^* C_k \tilde{T}_{mk}, \quad (17)$$

где

$$\tilde{T}_{mk} = \langle \psi_m | \hat{T} + \chi | \psi_k \rangle = T_{mk} + \chi \langle \psi_m | \psi_k \rangle.$$

Из (17) для чисел заполнения  $P_n(t) = |C_n(t)|^2$  следует:

$$\frac{\partial P_n}{\partial t} = \frac{2\alpha}{\hbar(1+\alpha^2)} P_n \left( -\tilde{T}_{nm} + P_n \sum_{m,k} \sqrt{P_m P_k} |\tilde{T}_{mk}| \cos(\vartheta_{mk}) \right). \quad (18)$$

В (18) аргумент косинуса – это фаза комплексного числа  $C_m^*(t) C_k(t) \tilde{T}_{mk}$ . Если рассматривать равновесное состояние выделенной квантовой подсистемы  $\left( \frac{\partial P_n}{\partial t} = 0 \right)$ , то получающаяся из (18) система уравнений имеет решение, при условии, что

отличным от нуля является только одно из чисел  $P_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), т.е. числа заполнения могут принимать значения только 0 и 1. При этом автоматически выполняется условие  $\sum_n P_n(t) = 1$ . Это

значит, что наиболее вероятными состояниями стационарной квантовой подсистемы являются состояния, описываемые собственными функциями гамильтониана уравнения (15). Однако заселенности различных квантовых уровней могут изменяться со временем.

При анализе динамики изменения заселенного уровня из-за наличия обратной связи необходимо одновременно отслеживать поведение всех квантовых уровней, в том числе и незаполненных. Для «чистых» состояний  $\psi = C_n(t) \psi_n(\mathbf{r})$  уравнение (17) совпадает по форме с хорошо изученным [12] уравнением, описывающим однопараметрическое семейство векторных полей на плоскости:

$$\frac{dz}{dt} = z(ip + \varepsilon + kzz^*), \quad (19)$$

где

$$\varepsilon = -\frac{\alpha}{(1+\alpha^2)\hbar} (T_{nn} + \chi) < 0. \quad (20)$$

Известно, что при  $\varepsilon < 0$  точка  $z = 0$  является положением устойчивого равновесия. Это значит, что если параметр  $\alpha$  существенно отличается от нуля, то незаполненные состояния выделенной подсистемы являются устойчивыми. Следовательно, в отсутствие  $\mathbf{E}(t)$  состояние этой подсистемы может спонтанно измениться только при стремлении  $\varepsilon$  к нулю. Причем в работах [12, 13] показано, что поскольку уравнение (19) имеет особенность типа складки, при подходе  $\varepsilon$  к нулю с отрицательной стороны при некотором малом, но отличном от нуля значении  $|\varepsilon| = \delta$  имеющиеся возмущения могут выкинуть систему из окрестности положения равновесия. При этом система перескочит или к другому далекому положению равновесия, или к какому-либо предельному циклу, или к другому более сложному притягивающему множеству. Возможность такой «катастрофы» [13] имеет важное значение. Она показывает, что при изменении плотности окружения при значениях параметра  $\alpha$  меньше некоторого критического значения, при котором уравнение Шредингера (10) все еще остается нелинейным, возможно скачкообразное изменение заселенности квантовых уровней выделенной подсистемы.

## Состояния осцилляторов, испытывающих перманентное стохастическое возмущение

Динамика изменения заселенности уровней квантового осциллятора определяется набором параметров, вытекающих из (15).

В [3] получено, что в одномерном случае волновые функции осциллятора, удовлетворяющие

(15), выражаются через полиномы Эрмита комплексной переменной:

$$\psi_n(\xi) = A_n (-1)^n \exp\left(\sqrt{1+i\alpha} \frac{\xi^2}{2}\right) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp\left(-\sqrt{1+i\alpha} \xi^2\right)$$

( $A_n$  – нормировочная константа, а  $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ ;  $x$  – обычная координата), а константы разделения в нем являются комплексными величинами:

$$E_n = \frac{1}{\sqrt{1+i\alpha}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \frac{\chi}{1+i\alpha} \quad (21)$$

( $\omega$  – собственная частота колебаний осциллятора,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ).

Из (21) следует, что с точностью до  $O(\alpha^2)$  для диагональных матричных элементов кинетической энергии справедливо

$$T_{nn} = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega.$$

Тогда в отсутствие регулярного во времени возмущения изменение состояния равновесия для незаполненного квантового уровня осциллятора согласно (20) возможно только при

$$\alpha \leq \alpha_n = 2\hbar\delta / \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + 2\chi\right]. \quad (22)$$

Следовательно, вероятность изменения этого состояния равновесия пропорциональна вероятности того, что в результате флуктуаций плотности окружения осциллятора параметр  $\alpha$  окажется в интервале от нуля до  $\alpha_n$ . Поскольку априори предполагается, что система permanently испытывает стохастическое возмущение, а параметр  $\alpha_n$  мал, можно, не конкретизируя вид плотности вероятности  $f(\alpha)$ , положив только  $f(0) = 0$ , приближенно записать

$$F(\alpha_n) = \int_0^{\alpha_n} f(\alpha) d\alpha \approx C_1 \alpha_n + O(\alpha^2), \quad (23)$$

где  $C_1$  – константа.

Однако изменение заселенности квантовых уровней осциллятора при  $\alpha \leq \alpha_n$  может происходить не всегда. Чтобы рассмотреть, как возникновение предпосылок для выхода из состояния равновесия влияет на заселенность энергетических уровней осциллятора, выделим два его собственных состояния  $\psi_n(\mathbf{r}, t)$  и  $\psi_m(\mathbf{r}, t)$ , между которыми возможен переход. Положим для определенности, что первоначально  $P_{n0} = 1$ ;  $P_{m0} = 0$ . В двухуровневом приближении (18) представляет собой систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_n}{\partial t} &= \frac{2\alpha}{\hbar(1+\alpha^2)} P_n (-\tilde{T}_{nn} + P_n \tilde{T}_{nn} + P_m \tilde{T}_{mm} + \\ &+ 2\sqrt{P_n P_m} |\tilde{T}_{nm}| \cos(\vartheta_{nm})) = F(P_n, P_m), \\ \frac{\partial P_m}{\partial t} &= \frac{2\alpha}{\hbar(1+\alpha^2)} P_m (-\tilde{T}_{mm} + P_n \tilde{T}_{nn} + P_m \tilde{T}_{mm} + \\ &+ 2\sqrt{P_n P_m} |\tilde{T}_{nm}| \cos(\vartheta_{nm})) = \Phi(P_n, P_m). \end{aligned} \quad (24)$$

Согласно общим свойствам нелинейных систем на плоскости [14] устойчивость стационарной точки зависит от правой части системы уравнений (24). В частности, необходимым условием отсутствия рядом других точек равновесия является отличие от нуля вычисленного при  $P_{n0} = 1$ ,  $P_{m0} = 0$  якобиана

$$\Delta = \begin{vmatrix} F'_{P_n}(P_n, P_m) & F'_{P_m}(P_n, P_m) \\ \Phi'_{P_n}(P_n, P_m) & \Phi'_{P_m}(P_n, P_m) \end{vmatrix}.$$

Вторая величина, определяющая свойства нелинейной системы уравнений, – это вычисленная при тех же условиях суперпозиция

$$\sigma = F'_{P_n}(P_n, P_m) + \Phi'_{P_m}(P_n, P_m).$$

Отметим, что в случае испытывающего перманентное стохастическое возмущение осциллятора с точностью до малых более высокого порядка для этих параметров справедливо

$$\begin{aligned} \Delta &= (\alpha\omega)^2 \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\chi}{\hbar\omega}\right) (n - m); \\ \sigma &= \alpha\omega \left(2n - m + \frac{1}{2} + \frac{2\chi}{\hbar\omega}\right). \end{aligned}$$

Притягивающими множествами в рассматриваемом случае кроме точек равновесия могут быть замкнутые кривые. Однако они возникают только при выполнении ряда условий. В частности, если первоначально  $n > m$ , то предпосылок для возникновения замкнутых кривых нет. Поскольку если осциллятор в результате возмущения окажется в суперпозиционном состоянии, то согласно (14) и (21) с течением времени волновая функция будет стремиться к сохраняющей нормировку во времени волновой функции нижнего состояния. Это значит, что при «катастрофе» осциллятор будет просто перескакивать в нижнее состояние. Такое перескакивание естественно интерпретировать как квантовый скачок.

В случае, когда заселен нижний энергетический уровень, ситуация иная. Выход осциллятора при  $\Delta < 0$  из положения равновесия происходит по траектории, представляющей собой петлю, устойчивость которой зависит от знака  $\sigma$  [14]. При положительном значении параметра  $\sigma$  эта петля неустойчива, и в этом случае квантовый скачок возможен. Если же этот параметр меньше нуля, то, даже если эта петля проходит через другую точку равновесия ( $P_n = 0$ ,  $P_m = 1$ ), осциллятор вернется в исходное состояние. Следовательно, осциллятор может перейти только на те верхние уровни, квантовые числа которых удовлетворяют условию

$$m \leq 2n + 1/2 + 2\chi/(\hbar\omega).$$

Записанное соотношение указывает на то, что при эффективной температуре ниже предела

$$T^* < \hbar\omega/(2k) \quad (25)$$

должна наблюдаться Бозе-конденсация состояний осциллятора [3].

Распределение заселенности различных квантовых состояний можно найти в результате численного моделирования. Для этого достаточно определить среднюю по ансамблю осцилляторов обусловленную квантовыми переходами вероятность заселения каждого энергетического уровня.

Согласно (22) и (23) для вероятности перехода осциллятора с заполненного  $n$ -го уровня на вакантный уровень с номером  $m$  с точностью до множителя  $1/Z_n$  справедливо

$$Q(n, m) = \frac{1}{Z_n} \frac{\eta(n, m)}{\left(1 + \frac{\left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}{kT^*}\right)}, \quad (26)$$

где

$$\eta(n, m) = \begin{cases} 1 & \left(m \leq 2n + \frac{1}{2} + \frac{kT^*}{\hbar\omega}\right), \\ 0 & \left(m > 2n + \frac{1}{2} + \frac{kT^*}{\hbar\omega}\right). \end{cases} \quad (27)$$

Поскольку переход осциллятора с уровня на уровень не является детерминированным процессом, формулы (26) и (27) справедливы и в случае, когда осциллятор при возникновении предпосылок изменения состояния в итоге вернется в исходное состояние. Поэтому величина  $Z_n$  — это статистическая сумма:

$$Z_n = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\eta(m, n)kT^*}{kT^* + \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}.$$

Один из возможных алгоритмов вычисления вероятности заселения квантовых уровней заключается в следующем. Первоначально задается произвольное распределение вероятности заселенности  $m_{\max}$  ( $m_{\max}$  — количество принимаемых во внимание дискретных квантовых состояний) уровней осциллятора  $P_m$  (на  $P_m$  накладывается естественное усло-

вие  $\sum_{m=0}^{m_{\max}} P_m = 1$ ). Затем случайным образом выбира-

ется номер  $n$  какого-либо уровня и в предположении, что с него возможен переход, вычисляется изменение величин  $P_m$  ( $m = 0, 1, \dots, m_{\max}$ ).

В случае большого числа осцилляторов в каком-либо ансамбле предпосылки выхода осциллятора из положения равновесия не зависят от номера «заполненного» состояния и не для всех осцилляторов ансамбля, находящихся на  $n$ -м энергетическом уровне, создаются предпосылки выхода из данного состояния. Поэтому при учете теоремы Байеса [15] изменение вероятности  $\Delta P_m$  заселения квантового уровня с номером  $m$  вычисляется по формуле

$$\Delta P_m = \begin{cases} vP_n Q_{nm} & (m \neq n) \\ vP_n (Q_{mm} - 1) & (m = n), \end{cases}$$

где  $v$  — равномерно распределенное на отрезке  $[0, 1]$  случайное число.

Найденные значения  $\Delta P_m$  прибавляются к  $P_m$ . В результате получается некоторое новое распределение, для которого повторяется та же процедура. Суммируя для каждого уровня получаемые величины  $P_m$ , после достаточно большого количества итераций вычисляют среднее значение  $\langle P_m \rangle$  вероятности заселения каждого энергетического уровня:

$$\langle P_m \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{It} (P_m)_i}{It}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, m_{\max},$$

$It$  — число итераций;  $(P_m)_i$  — текущее значение вероятности заселенности уровня с номером  $m$ .

Получаемое в результате таких вычислений распределение является искомым, усредненным по ансамблю осцилляторов распределением вероятности заселения энергетических уровней осциллятора, взаимодействующего с окружающей средой.

## Результаты математического эксперимента

На рис. 1–3 представлены результаты численного моделирования, полученные с помощью описанного выше алгоритма для различных величин  $y = \hbar\omega/(kT)$ . Найденное распределение вероятности заселения энергетических уровней показано кружками, сплошная линия с квадратиками — приведенное для сравнения распределение Больцмана.

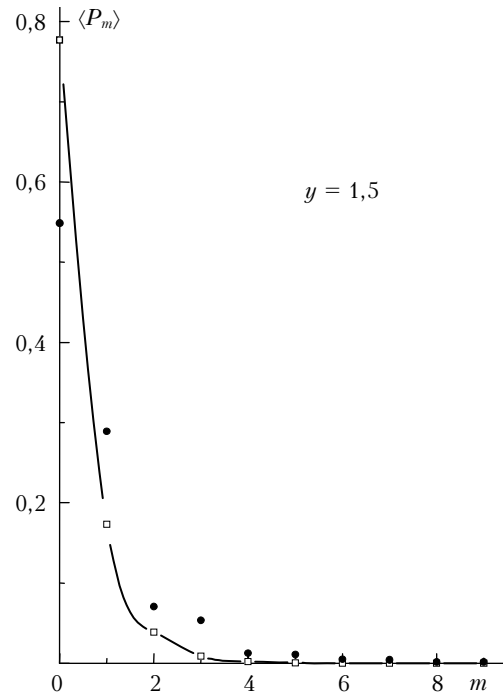


Рис. 1

Все распределения получены в результате усреднения  $10^7$  ансамблей, рассчитанных при  $m_{\max} = 200$ .

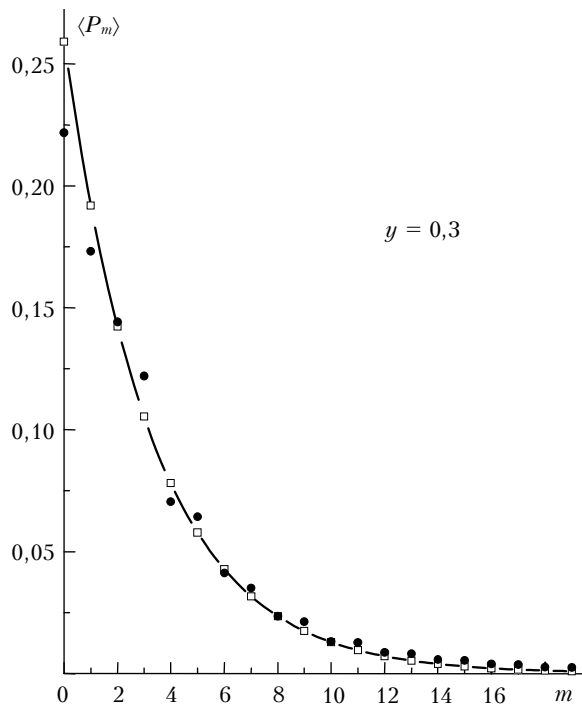


Рис. 2

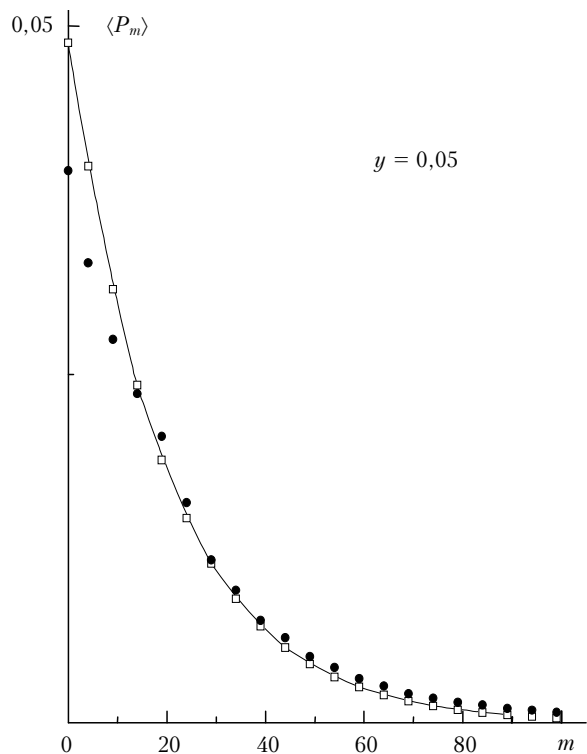


Рис. 3

Как видно из рис. 1–3, наличие перманентного стохастического возмущения и взаимодействия осцилляторов с окружающей средой приводит к тому, что вероятности заселения нижних уровней осциллятора оказываются значительно больше, чем вероятности заселения верхних. Причем найденные распределения вероятностей довольно близки к распределению Больцмана. Отметим, что численное моделирование при  $y > 2$  показало, как и ожидалось, наличие Бозе-конденсации состояний осциллятора.

Переходы с верхних квантовых уровней на нижние связаны с излучением электромагнитной энергии. Поэтому рассмотренный механизм заселения энергетических уровней квантового осциллятора дает возможность при заданном значении параметра  $y$  определить спектральное распределение  $I(\Delta n)$  спонтанного излучения ансамбля слабосвязанных осцилляторов ( $\Delta n$  – разность номеров уровней). Для этого достаточно оценить вклад в энергию излучения каждого возможного перехода с верхнего энергетического уровня на нижний. На рис. 4–6 приведены соответствующие зависимости, вычисленные при тех же параметрах, что и распределения вероятностей на рис. 1–3.

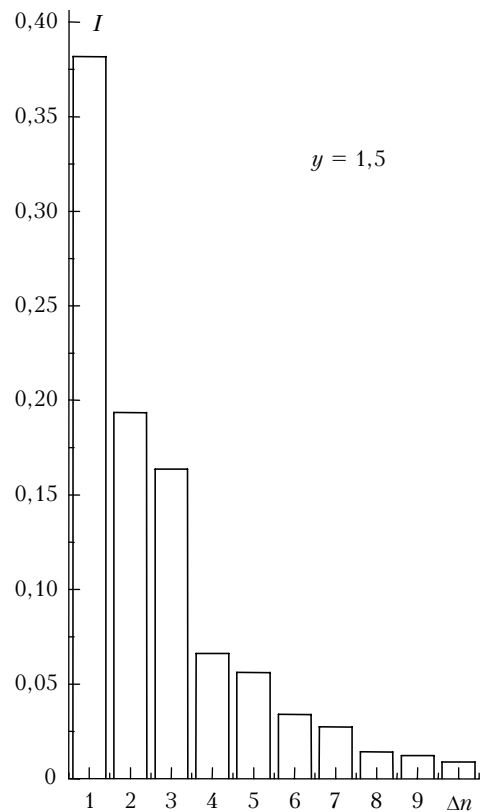


Рис. 4

Из представленных зависимостей следует, что при относительно больших значениях параметра  $y$  основная энергия излучается при переходах между близкими уровнями. Однако с ростом температуры максимум излучения все более смещается в коротковолновую область. Причем, исходя из данных численного эксперимента для длины волны, на которую приходится максимум излучения, можно записать приближенное эмпирическое соотношение:  $\lambda = \beta/T$ , где  $\beta = 1,7 \cdot 10^{-2}$  м · К.

## Заключение

Таким образом, как следует из полученных результатов, основными причинами того, что физические системы, близкие по свойствам к осцилляторам, находятся в состояниях, совпадающих с собственными функциями стационарного уравнения Шредингера, а их переходы из состояния в состояние происходят скачком, являются постоянное стохастическое возмущение и взаимодействие осцилляторов с окружающей средой. Влиянием этих факторов обусловлено и то, что у осцилляторов вероятность заселения нижележащих энергетических уровней оказывается больше, чем вероятность заселения верхних.

В заключение отметим одно следствие Бозе-конденсации состояний осцилляторов, испытывающих постоянное стохастическое возмущение, могущее иметь прикладное значение и нуждающееся в экспериментальной проверке. Эта конденсация не зависит от того, сталкиваются ли осцилляторы друг с другом или с другими частицами, например электронами. При ее возникновении, по сути, прекращается обмен энергией между окружающей средой и колебательными степенями свободы осцилляторов. Это обстоятельство указывает на то, что у веществ, имеющих свободные носители заряда и близких по свойствам к системе слабо связанных осцилляторов, при протекании электрического тока при температуре ниже  $T = \hbar\omega/(2k)$  ( $\omega$  — частота собственных колебаний осцилляторов материала) энергия, идущая на нагрев, должна быть минимальна.

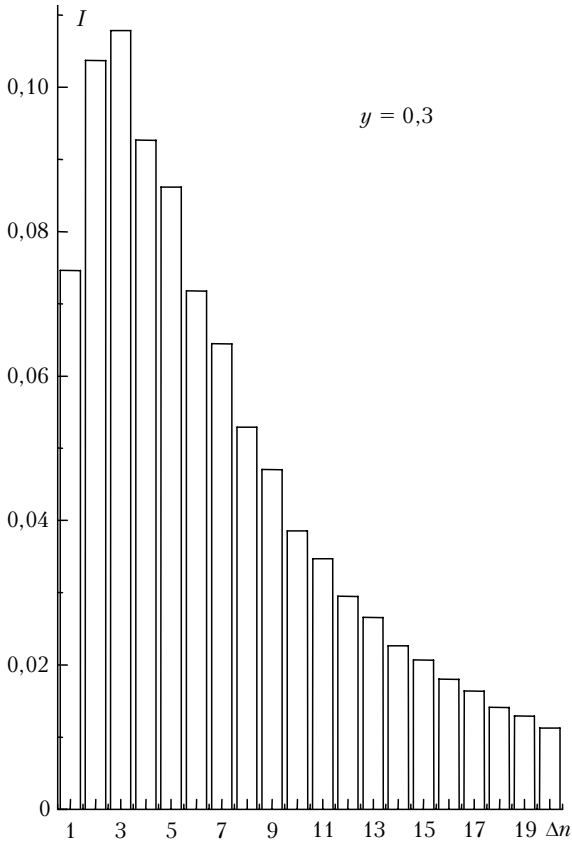


Рис. 5

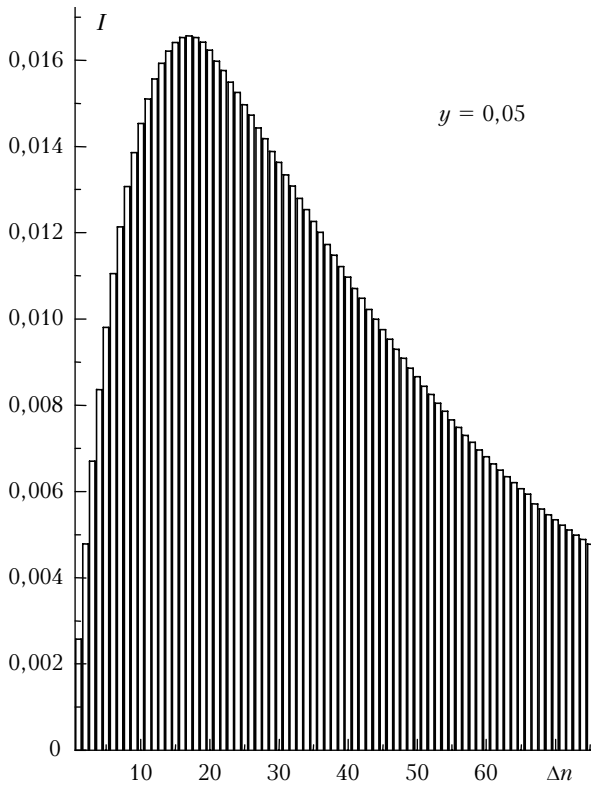


Рис. 6

1. *Иванов В.Н.* К вопросу о рассеянии нестабильных частиц. Омск, 1986. 13 с. Деп. в ВИНТИ редакцией журн. «Изв. вузов. Физ.» № 8176-B86 // Изв. вузов. Физ. 1987. № 7. С. 118.
2. *Иванов В.Н.* Эвристический способ описания релаксации квантовых систем // Изв. вузов. Физ. 1996. Т. 39. № 2. С. 7–13.
3. *Иванов В.Н.* Влияние нелинейного взаимодействия молекул на их излучение // Оптика атмосф. и океана. 2002. Т. 15. № 3. С. 275–280.
4. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям / Пер. с англ. М.: Мир, 1968. 382 с.
5. *Чандрасекар С.* Стохастические проблемы в физике и астрономии / Пер. с англ. М.: Из-во иностр. лит-ры, 1947. 166 с.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1973. 208 с.
7. *Иванов В.Н.* Связь эффективных волновых функций с формализмом матрицы плотности // Изв. вузов. Физ. 1998. Т. 41. № 7. С. 13–17.
8. *Лэкс М.* Флуктуации и когерентные явления / Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 299 с.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963. 702 с.
10. *Ву Т.Ю., Омута Т.* Квантовая теория рассеяния. М.: Наука, 1969. 452 с.
11. *Surian P.R., Angyan J.* Perturbation theory for nonlinear time-independent Schrodinger equations // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. N 1. P. 45–48.



12. Арнольд В.И. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978. 304 с.
13. Арнольд В.И. Теория катастроф. М.: Наука, 1990. 127 с.
14. Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г. Теория бифуркаций динамических систем на плоскости. М.: Наука, 1967. 487 с.
15. Худсон Д. Статистика для физиков / Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 296 с.

*V.N. Ivanov, I.V. Ivanov. Thermal radiation of a system of weakly-connected oscillators experiencing a permanent stochastic disturbance.*

The feedback effect of oscillators interacting with the environment on population of their quantum states and thermal radiation is considered. The oscillator self-acting is modeled via non-linear operator in the Schrodinger equation. The oscillator stationary eigenstates are shown to be most probable in the presence of a permanent stochastic disturbance; the quantum state change in this case can be only in the form of a jump. At a temperature  $T$  lower  $\hbar\omega/2k$  ( $\omega$  is the frequency of oscillator vibrations;  $k$  is the Boltzman constant), the Bose-condensation of the oscillator quantum states takes place. The conducted numerical simulation shows that at a higher temperature the distribution of probability of energy level population for oscillators interacting with environment is rather close to the Boltzman distribution. At relatively low temperatures, the radiation is mainly due to quantum transitions between the nearest levels. When the temperature increases, maximum of the radiation energy shifts to the short-wave spectral range.