КВАЗИЧАСТИЦЫ В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТИПА ХАРТРИ

А.Е. Кулагин
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Ю. Трифонов, ассистент, к.ф.-м.н. Е.А. Левченко
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: aek8@tpu.ru

QUASIPARTICLES IN THE SEMICLASSICAL APPROXIMATION OF THE 2D HARTREE TYPE EQUATION

A.E. Kulagin
Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.Yu. Trifonov, Assistant Professor, PhD. E.A. Levchenko
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: aek8@tpu.ru

Abstract*. Semiclassical asymptotics have been constructed for the two-dimensional Hartree type equation. The dynamics of the initial state, which is the superposition of two wave packets, has been studied. The constructed solution has been interpreted as an interaction of two quasiparticles to the semiclassical approximation. Equations, describing the dynamics of quasiparticles, have been obtained.*

Двумерное уравнение типа Хартри

$$\left\{-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{k_1x^2}{2} + \frac{k_2y^2}{2} + \lambda V_0 \int\limits_{\mathrm{R}^2} W(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\left|\Psi(\boldsymbol{x}',t)\right|^2 d\boldsymbol{x}'\right\}\Psi(\boldsymbol{x},t) = 0, \tag{1}$$

где $W(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{\gamma_1^2} - \frac{(y-y')^2}{\gamma_2^2}\right]$, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, $\lambda V_0 < 0$, используется для описания бозе-эйнштейновского конденсата в поле магнитной ловушки. Слагаемое $k_1x^2/2 + k_2y^2/2$ описывает потенциал магнитной ловушки, а $W(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ – потенциал взаимодействия.

Обозначим $\alpha^{k,l,m,n}$ центральные моменты волновой функции

$$\alpha^{k,l,m,n}(t)[\Psi] = \frac{1}{\|\Psi\|^2}\int\limits_{\mathrm{R}^2} \Psi^*(x,y,t)\left\{(\Delta x)^k(\Delta y)^l(\Delta\hat{p}_x)^m(\Delta\hat{p}_y)^n\right\}\Psi(x,y,t)\,d\boldsymbol{x} \tag{2}$$

где $\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}(t)$, $\Delta\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{P}(t)$, $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$, а $\boldsymbol{X}(t)$ и $\boldsymbol{P}(t)$ – первые начальные моменты волновой функции. Фигурными скобки обозначают упорядочивание по Вейлю (см. [1]). В работе [2] было показано, что на классе траекторно сосредоточенных функций справедливы оценки

$$\alpha^{k,l,m,n} = \hat{\mathrm{O}}\left(\hbar^{(k+l+m+n)/2}\right), \quad (\Delta\boldsymbol{x})^\nu = \hat{\mathrm{O}}\left(\hbar^{|\nu|/2}\right). \tag{2a}$$

Первые начальные моменты определяются стандартным образом:

$$\boldsymbol{X}(t)[\Psi] = \begin{pmatrix} X_x(t) \\ X_y(t) \end{pmatrix} = \int\limits_{\mathrm{R}^2} \Psi^*\boldsymbol{x}\Psi d\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{P}(t)[\Psi] = \begin{pmatrix} P_x(t) \\ P_y(t) \end{pmatrix} = \int\limits_{\mathrm{R}^2} \Psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\Psi d\boldsymbol{x}. \tag{3}$$

Продифференцировав выражения (3) с учетом уравнения (1) и коммутационного соотношения $[\Delta x_{\mathrm{j}},\Delta\hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk}$ получим систему уравнений на первые начальные моменты

$$\begin{cases}\dot{\boldsymbol{P}}(t)=-K\cdot\boldsymbol{X}(t),\\ \dot{\boldsymbol{X}}(t)=\dfrac{1}{m}\boldsymbol{P}(t),\end{cases}\quad K=\begin{pmatrix}k_1 & 0\\ 0 & k_2\end{pmatrix}. \tag{4}$$

Аналогично с точностью до моментов второго порядка получим уравнения на центральные моменты волновой функции

$$\begin{cases}\dot{\boldsymbol{\alpha}}^{2,0}=2H_{pp}\boldsymbol{\alpha}^{1,1},\\ \dot{\boldsymbol{\alpha}}^{0,2}=-2H_{xx}\boldsymbol{\alpha}^{1,1},\\ \dot{\boldsymbol{\alpha}}^{1,1}=H_{pp}\boldsymbol{\alpha}^{0,2}-H_{xx}\boldsymbol{\alpha}^{2,0},\end{cases}\quad \boldsymbol{\alpha}^{1,1}=\begin{pmatrix}\alpha^{1,0,1,0}\\ \alpha^{0,1,0,1}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}^{2,0}=\begin{pmatrix}\alpha^{2,0,0,0}\\ \alpha^{0,2,0,0}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}^{0,2}=\begin{pmatrix}\alpha^{0,0,2,0}\\ \alpha^{0,0,0,2}\end{pmatrix}. \tag{5}$$

Здесь обозначено $H_{pp}=\mathrm{diag}\left(\dfrac{1}{m};\dfrac{1}{m}\right)$, $H_{xx}=\mathrm{diag}\left(k_1-2\|\Psi\|^2\lambda V_0\dfrac{1}{\gamma_1^2};k_2-2\|\Psi\|^2\lambda V_0\dfrac{1}{\gamma_2^2}\right)$.

Систему (4), (5) будем называть системой Гамильтона-Эренфеста 2-ого порядка.

С учетом оценок (2а) запишем

$$\begin{gathered}\left\{-i\hbar\partial_t+\hat{H}_0(t,\mathbf{C})\right\}\Psi(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{O}\left(\hbar^{3/2}\right),\\ \hat{H}_0(t,\mathbf{C})=\frac{\langle\Delta\hat{\boldsymbol{p}},\Delta\hat{\boldsymbol{p}}\rangle+2\langle\boldsymbol{P}(t),\Delta\hat{\boldsymbol{p}}\rangle+\langle\boldsymbol{P}(t),\boldsymbol{P}(t)\rangle}{2m}+\frac{k_1}{2}\left(\Delta x^2+2X_x(t)\Delta x+X_x^2(t)\right)\\ +\frac{k_2}{2}\left(\Delta y^2+2X_y(t)\Delta y+X_y^2(t)\right)+\|\Psi\|^2\lambda V_0\left(1-\frac{1}{\gamma_1^2}\Delta x^2-\frac{\alpha^{2,0,0,0}(t)}{\gamma_1^2}-\frac{1}{\gamma_2^2}\Delta y^2-\frac{\alpha^{0,2,0,0}(t)}{\gamma_2^2}\right),\end{gathered} \tag{6}$$

где $\mathbf{C}=\left(\boldsymbol{P}_0,\boldsymbol{X}_0,\boldsymbol{\alpha}_0^{2,0},\boldsymbol{\alpha}_0^{1,1},\boldsymbol{\alpha}_0^{0,2}\right)$.

Здесь моменты волновой функции заменены на решения уравнений (4) и (5) с начальными условиями, определяемыми начальным условием для волновой функции и соотношениями (2), (3). Квазиклассическая функция Грина уравнения (6) $G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t,s,\mathbf{C})$ находится стандартным способом (см. например [2]). Пусть $\Psi(\boldsymbol{x},t)|_{t=0}=\varphi(\boldsymbol{x})$. Тогда функция

$$\Phi(\boldsymbol{x},t,\mathbf{C})=\int_{\mathrm{R}^2}\varphi(\boldsymbol{x}')G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t,0,\mathbf{C})d\boldsymbol{x}', \tag{7}$$

где $\mathbf{C}=\mathbf{C}[\varphi]$, будет являться асимптотическим решением уравнения (1). Точность этого решения исследовалась в работе [3]. Запишем начальное условие в виде

$$\varphi(\boldsymbol{x})=A\sum_{k=1}^{2}\varphi_k(\boldsymbol{x}),\quad \varphi_k(\boldsymbol{x})=N_k\exp\left\{-\frac{(x-x_k)^2}{2\sigma_{1,k}^2}-\frac{(y-y_k)^2}{2\sigma_{2,k}^2}\right\}.$$

Здесь N_k, $\sigma_{1,k}$, $\sigma_{2,k}$, x_k, y_k – постоянные параметры, причем $\sigma_{i,k}=\mathrm{O}\left(\sqrt{\hbar}\right)$, $|\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_m|=\mathrm{O}\left(\sqrt{\hbar}\right)$ для $\forall i,k,m$. Обозначим

$$\Phi_k\left(\boldsymbol{x},t,\mathbf{C}[\varphi]\right)=\int_{\mathbb{R}^2}\varphi_k(\boldsymbol{x}')G\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t,0,\mathbf{C}[\varphi]\right)d\boldsymbol{x}'. \tag{8}$$

Уравнения на первые моменты функции (8) имеют вид

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{P}}[\Phi_k] = -H_{xx}\cdot\left(\boldsymbol{X}[\Phi_k] - \boldsymbol{X}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)\right) - K\cdot\boldsymbol{X}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right), \\ \dot{\boldsymbol{X}}[\Phi_k] = \dfrac{1}{m}\boldsymbol{P}[\Phi_k]. \end{cases}$$

Определим $\Delta\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}[\Phi_k]\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$, $\Delta\hat{\boldsymbol{p}}_k = \hat{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{P}[\Phi_k]\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$. Тогда система уравнений на вторые центральные моменты функции (8) будет идентична уравнениям (5) за исключением начальных условий.

Обозначим $\|\varphi_k\|^2 = \mu_k$, $\|\varphi\|^2 = A^2\mu$. Имеют место соотношения

$$\mu = \sum_{k=1}^{2}\mu_k + R_0[\varphi_1,\varphi_2], \quad \mu\boldsymbol{X}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right) = \sum_{k=1}^{2}\mu_k\boldsymbol{X}[\varphi_k] + \boldsymbol{R}_1[\varphi_1,\varphi_2], \quad \mu\frac{1}{m}\boldsymbol{P}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right) = \sum_{k=1}^{2}\mu_k\frac{1}{m}\boldsymbol{P}[\varphi_k]. \tag{9}$$

Если выполняется условие $\left[(x_1-x_2)^2/\left(\sigma_{1,1}^2+\sigma_{1,2}^2\right) + (y_1-y_2)^2/\left(\sigma_{2,1}^2+\sigma_{2,2}^2\right)\right] \gg 1$, то функции $R_0[\varphi_1,\varphi_2]$ и $\boldsymbol{R}_1[\varphi_1,\varphi_2]$ малы. Таким образом, соотношения (9) будут отвечать уравнению центра масс двух классических частиц. Поэтому назовем μ_k массой k-ой квазичастицы, μ – массой всей системы, $\boldsymbol{X}[\Phi_k]\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$ – координатой k-ой квазичастицы, $\boldsymbol{X}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$ – координатой центра масс системы, $(1/m)\boldsymbol{P}[\Phi_k]\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$ – скоростью k-ой квазичастицы, $(1/m)\boldsymbol{P}\left(t,\mathbf{C}[\varphi]\right)$ – скоростью центра масс системы.

На рис. 1 представлены графики сечения квадрата модуля волновой функции плоскостью $y=0$ в разные моменты времени в системе отсчета, связанной с «центром масс». На графиках видно поведение волновой функции, отвечающее притягивающему взаимодействию квазичастиц, причем при приближении квазичастиц друг к другу наблюдается интерференционная картина.

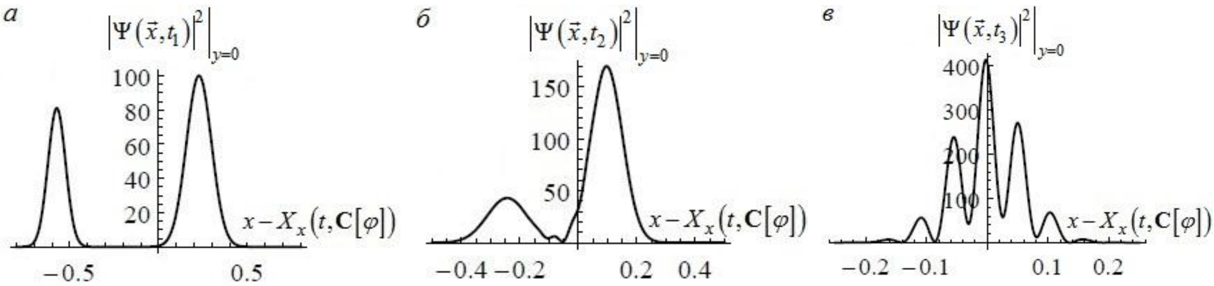

Рис. 1. $\left|\Psi(\boldsymbol{x},t_1)\right|^2\Big|_{y=0}$ для моментов времени $t_1 = 0$ (*а*); $t_2 = 0{,}8$ (*б*); $t_3 = 1{,}1$ (*в*)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

8. Карасев М.В. О вейлевском и упорядоченном исчислении некоммутирующих операторов. // Матем. заметки. – 1979. – Т. 26. – № 6. – С. 885–907.
9. Bagrov V.G., Belov V.V., Trifonov A.Yu. Semiclassical trajectory-coherent approximation in quantum mechanics: I. High order corrections to multidimensional time-dependent equations of Schrodinger type // Ann. of Phys. (NY). – 1996. – V. 246. – No 2. – P. 231–290.
10. Кулагин А. Е. Двумерное уравнение типа Хартри: квазиклассические асимптотики и невязка // Перспективы развития фундаментальных наук: сборник научных трудов XI Международной конференции студентов и молодых ученых. – Томск, 2014. – С. 609–611.