Kvantum nano-mechanikai súrlódás egyenleteiről

Diósi Lajos

MTA Wigner FK
Budapest

2014. máj. 5.

1. Nano-test, nano-oszcillátor
2. Súrlódás fenomenológia
   - Q-Langevin buktató
   - Q-Fokker-Planck buktató
   - Naiv Q-Langevin korrekciója
   - Naiv Q-Fokker-Planck korrekciója
3. Súrlódás mikroszkopikus modelljei
   - Mechanikai súrlódás oszcillátor fürdőben
   - Mechanikai súrlódás gázban
4. Záró megjegyzések ...

Nano-testek, nano-oszcillátorok

A téma

- Newtoni-ohmikus súrlódás $\dot{p} = -\gamma p$
- Masszív test (effektív) tömegközépponti p impulzusában
- Kvantumosan

Valóság 2000-

- óriásmolekula 'kétlyuk' interferencia
- rezgő tükör,-nyelv alapállapot körül
- csapdázott nano-, mikro, makrogolyó

  ... ejtve laborban, ejtőtoronyban, űrben

Modellek 1980-

- Q-Langevin
- Q-Fokker-Planck
- stochasztikus Schrödinger
- válaszfüggvények
- spektrális leírás

Súrlódás fenomenológia

Langevin (1908):

$$\dot{p}_t = -\gamma p_t + \sqrt{2D} w_t; \quad D = \gamma m k_B T = \gamma p_T^2; \quad \mathbf{M}[w_t w_s] = \delta(t-s)$$

Fokker-Planck (F. 1914, P. 1917):

$$\frac{d\rho(x,p;t)}{dt} = -\frac{p}{m}\frac{\partial\rho(x,p;t)}{\partial x} + D\frac{\partial^2\rho(x,p;t)}{\partial p^2} + \gamma\frac{\partial p\rho(x,p;t)}{\partial p}$$

Langevin és Fokker-Planck ekvivalensek:

$$\rho(x,p;t) \equiv \mathbf{M}\left[\delta(x-x_t)\delta(p-p_t)\right]$$

* * *

Naiv kvantum Langevin - Heisenberg kép - :

$$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma\hat{p}_t + \sqrt{2D} w_t$$

Naiv kvantum Fokker-Planck - Schrödinger kép -:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}(t)\right] - \frac{D}{\hbar^2}[\hat{x},[\hat{x},\hat{\rho}(t)]] - i\frac{\gamma}{2\hbar}[\hat{x},\{\hat{p},\hat{\rho}\}]$$

Naiv Q-Langevin és Q-Fokker-Planck nem ekvivalensek.

Q-Langevin buktató

Kvantum Langevin (Heisenberg kép):

$$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma \hat{p}_t + \sqrt{2D} w_t$$

A másik kanonikus mozgásegyenlet triviális:

$$\dot{\hat{x}}_t = \hat{p}/m$$

Heisenberg reláció $[\hat{x}_t, \hat{p}_t] = i\hbar$ nem teljesül:

$$\frac{d[\hat{x}_t, \hat{p}_t]}{dt} = [\dot{\hat{x}}_t, \hat{p}_t] + [\hat{x}_t, \dot{\hat{p}}_t] = -i\hbar\gamma \Longrightarrow [\hat{x}_t, \hat{p}_t] = i\hbar \mathrm{e}^{-\gamma t}$$

Miért nem probléma ez klasszikusan? És miért az kvantumosan?

Q-Fokker-Planck buktató

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}(t)\right] - \frac{\gamma p_T^2}{\hbar^2}[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}(t)]] - i\frac{\gamma}{2\hbar}[\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}\}]$$

Koordináta reprezentációban, $\rho(x, y) = \langle x | \hat{\rho} | y \rangle$:

$$\frac{d\hat{\rho}(x,y)}{dt} = \hat{H}\text{-rész} - \frac{\gamma p_T^2}{\hbar^2}(x-y)^2\hat{\rho}(x,y) - \frac{\gamma}{2}(x-y)\left(\frac{\partial\rho(x,y)}{\partial x} - \frac{\partial\rho(x,y)}{\partial y}\right)$$

Mibe fejlődik pl. $\rho(x, y; 0) = \psi(x)\psi(y)$, ha $\psi(x) = \mathcal{N}\exp(-x^2/4\sigma^2)$?

$$\rho(x, y; dt) = \rho(x, y; 0) - dt\gamma\left(\frac{p_T^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4\sigma^2}\right)(x-y)^2\rho(x, y; 0)$$

Diagonálisa $(x/\sigma)\psi(x)$ között $2dt\gamma\left(\frac{\sigma^2 p_T^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}\right)$, ha tehát

$$\sigma < \tfrac{1}{2}\hbar/p_T$$

(pl. T alacsony), akkor negatív sajátértéket (is) kap $\hat{\rho}(x, y; dt)$.
Miért nem probléma ez klasszikusan? És miért az kvantumosan?

Naiv Q-Langevin: korrekciója

Naiv Q-Langevin:

$$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma \hat{p}_t + \sqrt{2D} w_t; \quad \dot{\hat{x}}_t = \hat{p}/m; \quad \mathbf{M}[w_t ws] = \delta(t-s)$$

Heisenberg reláció $[\hat{x}_t, \hat{p}_t] = i\hbar$ nem teljesült: $d[\hat{x}_t, \hat{p}_t]/dt = -i\hbar\gamma$.

- Markovi korrekció: 2 fehér kvantum-zaj $\hat{w}_t, \hat{\tilde{w}}_t$

  $$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma \hat{p}_t + \sqrt{2\gamma} p_T \hat{w}_t; \;\; \dot{\hat{x}}_t = \frac{\hat{p}}{m} + \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \frac{\hbar}{p_T} \hat{\tilde{w}}_t; \;\; [\hat{\tilde{w}}_t, \hat{w}_s] = i\hbar\delta(t-s)$$

  Furcsaság: $\hat{x}$ is diffundál!
- Nem-markovi korrekció: 1 színes kvantum zaj $\hat{F}_t$:

  $$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma \hat{p}_t + \hat{F}_t; \quad \dot{\hat{x}}_t = \hat{p}/m; \quad \mathbf{M}[\hat{F}_t \hat{F}_s] = C(t-s)$$

  $\hat{F}_t$ részletei: mikroszkopikus tárgyalásból.

A markovi és nem-markovi korrekciók nem ekvivalensek.

Naiv Q-Fokker-Planck korrekciója

Naiv Q-Fokker-Planck:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}\right] - \frac{\gamma p_T^2}{\hbar^2}[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}]] - i\frac{\gamma}{2\hbar}[\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}\}]$$

Alacsony hőmérsékleten $\hat{\rho}$ negatív sajátértéket is kapott, $\hat{\rho} \geq 0$ sérült.

- Markovi korrekció: kiegészítés Lindblad alakra (D. 1993)

  $$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}\right] - \frac{\gamma p_T^2}{\hbar^2}[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}]] - i\frac{\gamma}{2\hbar}[\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}\}] - \frac{\gamma}{16 p_T^2}[\hat{p}, [\hat{p}, \hat{\rho}]]$$

  Furcsaság: $\hat{x}$ is diffundál!
- Nem-markovi korrekció: nincs egyszerű, általános zárt alak.

Súrlódás mikroszkopikus modelljei

A fenomenologikus Q-Langevin-Fokker-Planck buktatók kezelése:

$$\text{nanotest} + \text{tartály}$$

Jól számolható tartályok:

- oszcillátor-tartály, -hőfürdő
- gáz-tartály, -hőfürdő
- ???

Tartály mindig ideális (kölcsönhatás mentes) 'gáz'.
Nanotest súrlódását nem a tartály belső súrlódása okozza, mint pl. a klasszikus Stokes-súrlódást.
Viszkózus tartály hatása kvantumosan nehezen lenne számolható.
Szerencsére belső k.h. mentes 'gáz' is ad súrlódást.
Ezt számoljuk.

Mechanikai súrlódás oszcillátor fürdőben

Oszcillátor fürdő Hamilton$=\hbar\sum_\alpha \omega_\alpha \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\alpha$, csatolás$=-\hat{x}\hat{F}$

$$\text{Erő k.h. képben: } \hat{F}_t = \sum_\alpha g_\alpha(\hat{b}_\alpha \mathrm{e}^{-i\omega_\alpha t} + h.c.)$$

$C(t-s) = \mathbf{M}[\hat{F}_t\hat{F}_s]$ meghatározza nanotest dinamikáját!
'Ohmikus' fürdőben $\frac{\pi}{\hbar}\sum_\alpha g_\alpha^2 \delta(\omega-\omega_\alpha) = \gamma m\omega$, ekkor

$$C(t-s) = i\gamma m\hbar\delta'(t-s) + \frac{\gamma m\hbar}{\pi}\int \omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)\cos[\omega(t-s)]d\omega$$

Egzakt Q-Langevin egyenlet:

$$\dot{\hat{p}}_t = -\gamma\hat{p}_t + \hat{F}_t; \quad \dot{\hat{x}}_t = \hat{p}/m; \quad \mathbf{M}[\hat{F}_t\hat{F}_s] = C(t-s)$$

Ahogy T nő, $\hat{F}_t \Rightarrow$ kl. színes zaj $F_t \Rightarrow$ kl. fehér zaj $\sim w_t$ (D. 1993):

$$C(t-s) = 2\gamma m k_B T\delta(t-s) - \hbar^2\frac{\gamma m}{6k_B T}\delta''(t-s)$$

Mechanikai súrlódás gázban

Kíváncsi voltam: van-e $[\hat{p},[\hat{p},\hat{\rho}]]$ tag?
$\rho(\mathbf{p})=\langle\mathbf{p}|\,\hat{\rho}\,|\mathbf{p}\rangle$ klasszikus lineáris Boltzmannt követi.
Mit követnek a $\langle\mathbf{p}|\,\hat{\rho}\,|\mathbf{p}'\rangle$ off-diagonálisok?
Q-linear-Boltzmann (D. 1995):

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt}=\frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m},\hat{\rho}\right]-\frac{\gamma p_T^2}{\hbar^2}[\hat{\mathbf{x}},[\hat{\mathbf{x}},\hat{\rho}]]-i\frac{\gamma}{2\hbar}[\hat{\mathbf{x}},\{\hat{\mathbf{p}},\hat{\rho}\}-\frac{D_{xx}}{\hbar^2}[\hat{\mathbf{p}},[\hat{\mathbf{p}},\hat{\rho}]]$$

$$\gamma=\frac{1}{6p_T^2}\ \mathbf{M}[\text{ütk.gyak.}\times\text{átadott-impulzus-négyzet}]$$

$$\frac{D_{xx}}{\hbar^2}=\frac{1}{12}\frac{m_{\mathrm{gas}}}{p_T^4}\ \mathbf{M}[\text{ütk.gyak.}\times\text{gázmol.kin.energia}]$$

Furcsaság: $\hat{x}$ is diffundál!

Záró megjegyzések ...

1. **Markov közelítés**
A koordináta-diffúzió tag $d\hat{\rho}/dt = \ldots - D_{xx}\hbar^{-2}[\hat{p},[\hat{p},\hat{\rho}]]$ kényes.
For low T Markovian eq. may not exist at all (Leggett priv. 1993).
Linear Boltzmann: Az off-diagonális $\langle \mathbf{p} | \hat{\rho} | \mathbf{p}' \rangle$ dinamikája problémás (D. 2009, Kamleitner 2009).
Kiút: Alacsony T-re Q-nano súrlódásra nem-markovi egyenlet kell.
2. **Súrlódás szabad vagy kötött mozgásban**
Szabad mozgásnál folytonos a nanotest gerjeszthetősége.
Kötött mozgásnál, alacsony T-nél van szignifikáns gap.
És ez visszaadhatja a markovi közelítés érvényességét.
3. **Csillapított e.m. üregoszcillátor?**
Egyértelmű kl. és Q egyenletek!
Miért nem tudjuk ezt egy-az-egyben átvinni nanooszcira?
Hát: Üregoszciban x és p is csillapodik, méghozzá egyformán.
Nanooszciban csak (vagy elsősorban) p csillapodik!
Azért van átjárás a mechanizmusok és egyenleteik között.
4. **...**