

Užšaldytų modų artinys klasikinėse sistemose

Mode-freezing approximation in classical systems

Justina Vaičaitytė^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

justina.vaicaityte@ff.stud.vu.lt

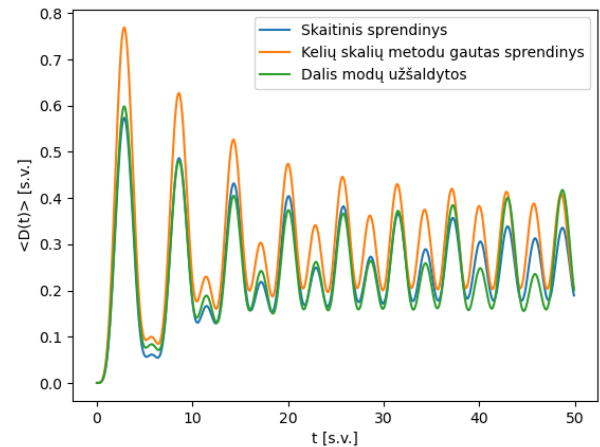
Artutiniai metodai yra svarbi matematikos ir fizikos dalis, naudojama sprendžiant įvairius uždavinius ir lygtis. Vienas iš tokių metodų privalumų yra tai, kad jie gali būti pritaikyti įvairiems uždaviniams spręsti, net jei jų analitiniai sprendiniai yra sudėtingi arba iš viso neegzistuoja. Todėl artutinių metodų taikymas yra plačiai paplitęs įvairiose mokslo srityse, ypač kvantinėje ir klasikinėje mechanikoje. Vis dėlto, dažnai tokie metodai nėra pakankamai tikslūs, todėl paprastai ieškoma įvairių alternatyvų klasikinėms trikdžių teorijos metodams siekiant patikslinti sprendinius. Fizikoje itin plačiai nagrinėjamos klasikinės ir kvantinės osciliatorių sistemos. Tokiu atveju alternatyvus artutinis metodas galėtų būti užšaldytų modų artinys. Nustatyta, jog nagrinėjant atvirąsias kvantines sistemas užšaldžius lėtus aplinkos laisvės laipsnius ir pritaikius įprastą Redfildo teoriją kitiems laisvės laipsniams rezultatų tikslumas ženkliai išauga. Parodyta, jog toks artinys ne tik padidina rezultatų tikslumą nemarkoviniuose režimuose, bet ir iš esmės turi panašias skaičiavimo sąnaudas [1]. Maža to, užšaldytų modų artinį galima pritaikyti ne tik kvantinėms, bet ir klasikinėms sistemoms.

Šiame darbe buvo tiriama klasikinė daugelio sukabintų osciliatorių sistema, kurioje nagrinėjamas vienas pagrindinis osciliatorius, o kiti sąveikaudami su juo sudaro jam aplinką. Pakeitus visus parametrus į bedimensius ir darant prielaidą, kad sąveikos koeficientai tarp osciliatorių yra maži, bei naudojantis kelių skalių metodu paremta trikdžių teorija buvo gauta per aplinkos osciliatorių pradines sąlygas (koordinatės ir judesio kiekius) suvidurkinta kvadratinio nuokrypio nuo pradinės padėties išraiška pagrindiniam osciliatoriui $\langle D(t) \rangle = \langle (X(t) - X_0)^2 \rangle$. Kaip ir buvo galima tikėtis, gautas sprendinys su tikslu skaitiniu sprendiniu gerai sutapo tik esant mažiems sąveikos tarp osciliatorių koeficientams, todėl, siekiant patikslinti sprendinį, trikdžių teorija buvo taikoma tik aukšto dažnio modoms, o žemo dažnio modos buvo užšaldytos (t.y. buvo laikoma, jog jų koordinatės ir judesio kiekiai laikui bėgant nekinta). Buvo

apibrėžta tokio pavidalo spektrinio tankio funkcija:

$$I(\omega) = \frac{\lambda\pi\omega}{\omega_c} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right), \quad (1)$$

čia λ —reorganizacijos energija, apibrėžianti suminių sistemos osciliatoriaus sąveikos su aplinkos osciliatoriais stiprį, ω —dažnis, ω_c —ribinis dažnis. Buvo lyginamas užšaldytų modų artinys su tikslu skaitiniu sprendiniu bei trikdžių teorijos sprendiniu keičiant parametrų vertes plačiuose intervaluose. Nustatyta, jog užšaldytų modų artinys gali ženkliai patikslinti trikdžių teorijos sprendinį įvairioms λ vertėms. Patikslinto sprendinio pavyzdys yra pateikiamas 1 pav.



1 pav.: Užšaldytų modų artinio palyginimas su tikslu skaitiniu sprendiniu ir kelių skalių metodo sprendiniu. Čia $\lambda = 0.1$, $\omega_c = 0.1$, užšaldyta 8% modų.

Reikšminiai žodžiai: užšaldytos modos, trikdžių teorija, klasikinė osciliatorių sistema.

Literatūra

[1] A. Montoya-Castillo, T. C. Berkelbach, D. R. Reichman, *The Journal of Chemical Physics* **143**, 194108 (2015).