

Динамика квантовой частицы в возмущенном двумерном параболическом потенциале

А.С. Мазманишвили¹, И.А. Князь^{2,*}

¹ ННЦ «Харьковский физико-технический институт», ул. Академическая, 1, 61108 Харьков, Украина

² Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

(Получено 12.02.2016; опубликовано online 29.11.2016)

В работе рассмотрена двумерная квантово-механическая задача о временной эволюции частицы в квадратичном потенциале, центр которого смещается произвольным образом во времени. Для произвольного момента времени построен явный вид волновой функции. Показано, что динамическое смещение центра параболического потенциала оставляет неизменной дисперсию. Показано, что в системе возможна реализация резонанса: при совпадении частоты возмущения потенциала с собственной частотой нарастает амплитуда колебаний волнового пакета частицы.

Ключевые слова: Квантовая частица, Уравнение Шредингера, Возмущенный потенциал.

DOI: [10.21272/jnep.8\(4\(1\)\).04014](https://doi.org/10.21272/jnep.8(4(1)).04014)

PACS numbers: 03.65. – w, 02.30.Jr

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие теории наносистем ставит перед исследователями новые задачи, которые являются производными классической задачи о динамике квантовой частицы в определенном силовом поле. Известно, что точно решаемые задачи являются исключением, что значительно сужает возможности детального анализа состояний квантовой системы при изменениях в ее структуре. Так, например, на сегодня практически отсутствуют точные решения практических задач в теории квантовых состояний физики конденсированного состояния, связанные с динамикой частицы в периодических полях, например, в кристаллах [1, 2].

В рамках различных методов эти задачи решались в ряде работ. В работе [3] было построено решение уравнения Шредингера с потенциалом, в котором периодическая часть, описывающая кристаллическую решетку, возмущается некоторым электромагнитным потенциалом. В работе [4] был рассмотрен случай возмущенного периодического оператора Шредингера, описывающего наличие примесей, кристаллическую поверхность и т.п. При этом были рассмотрены специфические одномерные модели потенциалов, и вопрос получения точных решений для более широкого класса моделей остался открытым. Приближенное решение нелинейного уравнения Шредингера в случае квадратичного потенциала для специфического класса моделей с быстро осциллирующим во времени возмущением было получено в работе [5]. Точное решение радиального уравнения Шредингера для деформированного квадратичного потенциала в двумерном случае было представлено в работе [6]. Решение нелинейного одномерного уравнения Шредингера с параболическим периодическим потенциалом было найдено в работе [7]. В работе [8] с помощью конформных отображений комплексной плоскости были получены точные решения двумерной квантовой задачи о частице без спина в двумерных потенциальных ямах. В работах [9-11] получено точное решение уравнения Шредингера для возмущенного потенциала, построенного на ос-

нове потенциала Гаусса. Показано, что малые деформации потенциала могут приводить к качественным изменениям формы волновой функции. Аналогичные результаты были получены в работе [12], где представлено решение нелинейного уравнения Шредингера с простым квадратичным потенциалом, модулированным пространственно-варьируемым коэффициентом дифракции.

Анализ публикаций по данной проблематике показывает, что малоизученным и актуальным, на сегодня, остается вопрос получения точных решений уравнения Шредингера в случае возмущенного потенциала, центр которого произвольным образом смещается во времени. В представленной работе рассматривается двумерная квантово-механическая задача о временной эволюции частицы в квадратичном возмущенном потенциале. Такая постановка задачи возникает в физических задачах, например, в том случае, когда смещение представляет собой траекторию случайного процесса, моделирующего искажения потенциала в процессе движения частицы (например, естественные случайные искажения кристаллической решетки). В реальных квантовых системах такая ситуация реализуется, например, при движении электрона достаточно большой энергии через кристалл вдоль одной из его кристаллических осей.

Отметим, что квадратичный потенциал в квантовой теории имеет важное значение, как при анализе спектров излучения, так и в качестве примера, допускающего точные и пригодные для анализа решения соответствующего уравнения Шредингера. Явные решения в таком потенциале и его обобщениях позволяют проанализировать динамику волновых функций и связанных с ними квантомеханических средних.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЕЕ РЕШЕНИЕ

2.1 Модель

Рассмотрим задачу о временной эволюции частицы с исходной волновой функцией $\psi(x_0, y_0, 0)$ в воз-

* knigorua@mail.ru

мущенном потенциале

$$V(x, y, t) = \frac{1}{2} m\omega_x^2 (x - f_x(t))^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 (y - f_y(t))^2, \quad (1)$$

где $f_x(t), f_y(t)$ – квадратично-интегрируемые функции; m, ω_x, ω_y – константы.

В этом случае волновая функция (функции Грина) $\Psi = \Psi(x, y, t; x_0, y_0, 0)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi + V(x, y, t) \Psi, \quad (2)$$

где \hbar – постоянная Планка.

Как известно, волновая функции Ψ имеет физическое содержание: она описывает амплитуду перехода из состояния в момент $t_0 = 0$, характеризуемого координатами (x_0, y_0) , в состояние в момент t , характеризуемого координатами (x, y) .

2.2 Решение начально-краевой задачи

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_x}{\partial t} \Psi_y + \Psi_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_y}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 (x - f_x(t))^2 \Psi_x \right) \Psi_y + \Psi_x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega_y^2 (y - f_y(t))^2 \Psi_y \right). \quad (6)$$

Сопоставляя левые и правые части выражения (6) приходим к выводу, что это выражение является тождеством.

Положим, что для каждой из координат x и y также справедливы уравнения Шредингера парциально для функций Грина $\Psi_x = \Psi_x(x, t; x_0, 0)$ и $\Psi_y = \Psi_y(y, t; y_0, 0)$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_x}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 (x - f_x(t))^2 \Psi_x, \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_y}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega_y^2 (y - f_y(t))^2 \Psi_y. \end{aligned} \quad (3)$$

Рассмотрим гипотезу о том, что полная функция Грина является произведением парциальных функций

$$\Psi(x, y, t; x_0, y_0, 0) = \Psi_x(x, t; x_0, 0) \Psi_y(y, t; y_0, 0). \quad (4)$$

Для проверки этой гипотезы подставим (4) в (2). Для производных по времени запишем

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_x \Psi_y) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_x}{\partial t} \Psi_y + \Psi_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_y}{\partial t}. \quad (5)$$

Подставив (3) в (5), имеем

Таким образом, гипотеза (4) подтверждается. Можно показать (детали в ПРИЛОЖЕНИИ А), что

$$\begin{aligned} \Psi_s(s, t; s_0, 0) &= \left(\frac{me^{i\omega_s t}}{\pi \hbar (e^{2i\omega_s t} - 1)} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m\omega_s}{2\hbar} (s^2 - s_0^2) - i \frac{m\omega_s^2}{2\hbar} \int_0^t f_s^2(\tau) d\tau \right) \times \\ &\times \exp \left(i \frac{\hbar}{2m_0} \int_0^t F_s^2(\tau) d\tau + sF_s(t) - \frac{m\omega_s}{\hbar(e^{2i\omega_s t} - 1)} \left[s - e^{i\omega_s t} s_0 - \frac{\hbar}{m} e^{i\omega_s t} \int_0^t F_s(\tau) e^{-i\omega_s \tau} d\tau \right]^2 \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где $s = \{x, y\}$,

$$F_s(\tau) = i \frac{m\omega_s^2}{\hbar} \int_0^\tau f_s(\tau') \exp[i\omega_s(\tau' - \tau)] d\tau'. \quad (8)$$

На основании (4) запишем функцию Грина

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, t; x_0, y_0, 0) &= \left(\frac{me^{i\omega_x t}}{\pi \hbar (e^{2i\omega_x t} - 1)} \frac{me^{i\omega_y t}}{\pi \hbar (e^{2i\omega_y t} - 1)} \right)^{1/2} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{m\omega_x}{2\hbar} (x^2 - x_0^2) - \frac{m\omega_y}{2\hbar} (y^2 - y_0^2) - i \frac{m\omega_x^2}{2\hbar} \int_0^t f_x^2(\tau) d\tau - i \frac{m\omega_y^2}{2\hbar} \int_0^t f_y^2(\tau) d\tau \right) \times \\ &\times \exp \left(i \frac{\hbar}{2m_0} \int_0^t F_x^2(\tau) d\tau + xF_x(t) - \frac{m\omega_x}{\hbar(e^{2i\omega_x t} - 1)} \left[x - e^{i\omega_x t} x_0 - \frac{\hbar}{m} e^{i\omega_x t} \int_0^t F_x(\tau) e^{-i\omega_x \tau} d\tau \right]^2 \right) \times \\ &\times \exp \left(i \frac{\hbar}{2m_0} \int_0^t F_y^2(\tau) d\tau + yF_y(t) - \frac{m\omega_y}{\hbar(e^{2i\omega_y t} - 1)} \left[y - e^{i\omega_y t} y_0 - \frac{\hbar}{m} e^{i\omega_y t} \int_0^t F_y(\tau) e^{-i\omega_y \tau} d\tau \right]^2 \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Решение $\psi(x, y, t)$ уравнения (2) с произвольным начальным условием $\psi(x_0, y_0, 0)$ в момент $t=0$ находится на основе найденной функции Грина по формуле

$$\psi(x, y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0, y_0, 0) \Psi(x, y, t; x_0, y_0, 0) dx_0 dy_0.$$

Соответственно, плотность распределения вероятностей

$$p(x, y, t) = |\psi(x, y, t)|^2.$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В качестве начальной волновой функции выберем функцию вида

$$\psi(x_0, y_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} (\omega_x \omega_y)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega_x}{2\hbar} x^2 - \frac{m\omega_y}{2\hbar} y^2\right].$$

Таким образом, в начальный момент времени

$$p(x, y, t) = \frac{m\sqrt{\omega_x \omega_y}}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{m\omega_x}{\hbar} \left(x - \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin\{\omega_x(t - \tau)\} d\tau\right)^2 - \frac{m\omega_y}{\hbar} \left(y - \omega_y \int_0^t f_y(\tau) \sin\{\omega_y(t - \tau)\} d\tau\right)^2\right]. \quad (10)$$

В дальнейшем при проведении расчетов будем полагать, что $m/\hbar = 1$. Рассмотрим частный случай, когда $f_x(t) = f_y(t) = 0$. Как и следовало ожидать, плотность распределения имеет единственный узкий пик в точке $x = 0, y = 0$ (рис. 1).

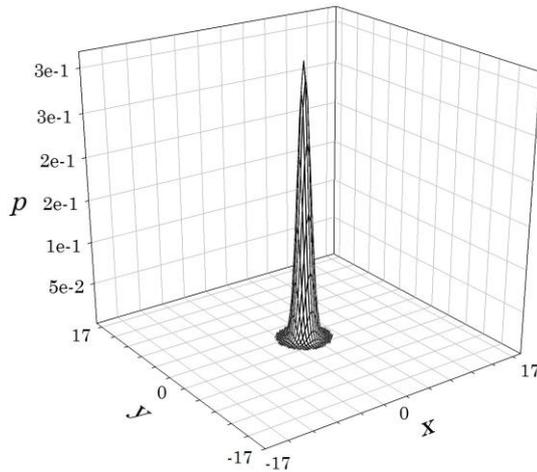


Рис. 1 – Плотность распределения вероятностей (10) для невозмущенного потенциала в момент времени $t = 0$. Параметры системы: $\omega_x = \omega_y = 1$

Примем, что при $t = 0$ центр волновой функции находится в начале координат, а смещение центра потенциала во времени описывается периодическими функциями:

$$\begin{aligned} f_x(t) &= 2[\theta(\sin(\omega t)) - 1/2], \\ f_y(t) &= \theta(\sin(\omega t)) - 1/2, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\theta(\cdot)$ – функция Хэвисайда (рис. 2).

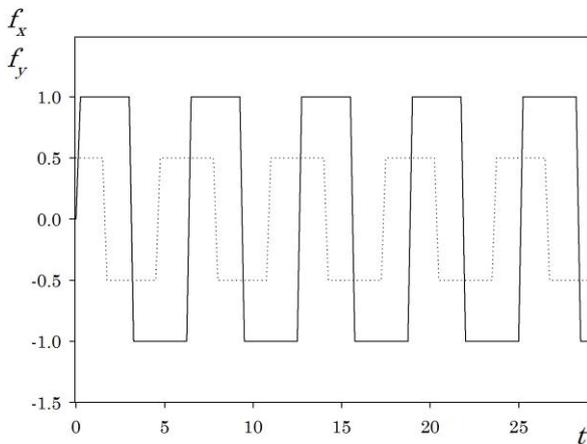


Рис. 2 – Смещение центра возмущенного потенциала. Параметры системы: $\omega_x = \omega_y = 4, \omega_1 = \omega_2 = 1$

центр волнового пакета находится в точке $x = 0, y = 0$. Выражение для плотности вероятности при таком выборе начальной волновой функции примет вид

Отметим, что решение уравнения (2) построено для произвольных интегрируемых функций $f_x(t)$ и $f_y(t)$. Функции $f_x(t)$ и $f_y(t)$ в виде (11) выбраны для наглядности. Соответствующая динамика смещения центра волновой функции во времени показана на рис. 3.

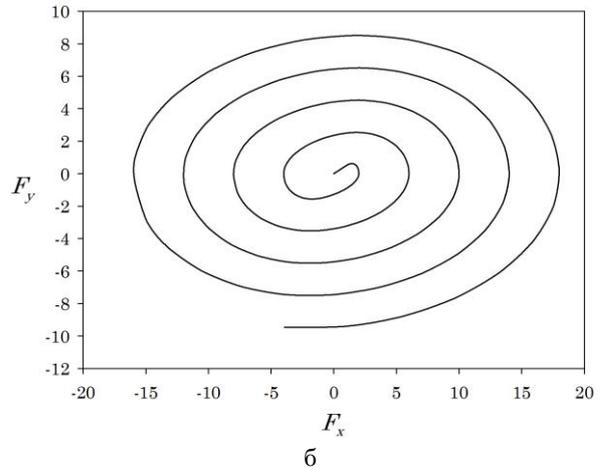
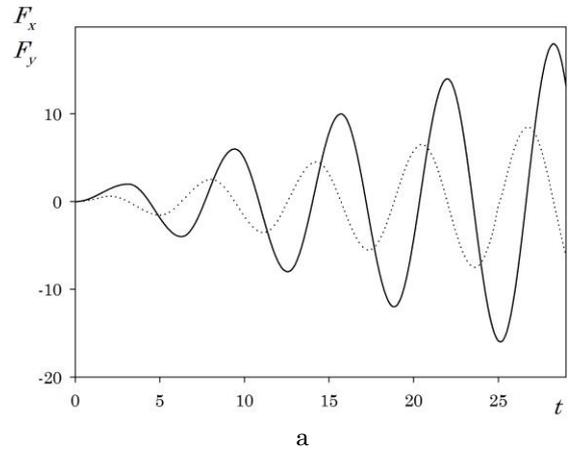


Рис. 3 – Временная эволюция центра волновой функции (8) на промежутке $t \in [0, 25]$ при совпадении частоты возмущающей силы и собственной частоты системы. Параметры системы: $\omega_x = \omega_y = 4, \omega_1 = \omega_2 = 1$

Простой анализ функций (8) показывает, что наиболее интересным будет случай, когда частота возмущений приближается к собственной частоте системы. На рис. 3 показана временная зависимость функций (8). Видно, что при совпадении частот волновой пакет меняет свою форму, при этом амплитудная огибающая растет пропорционально текущему времени – налицо возможность реализации явления резонанса по аналогии с резонансом в классической механике.

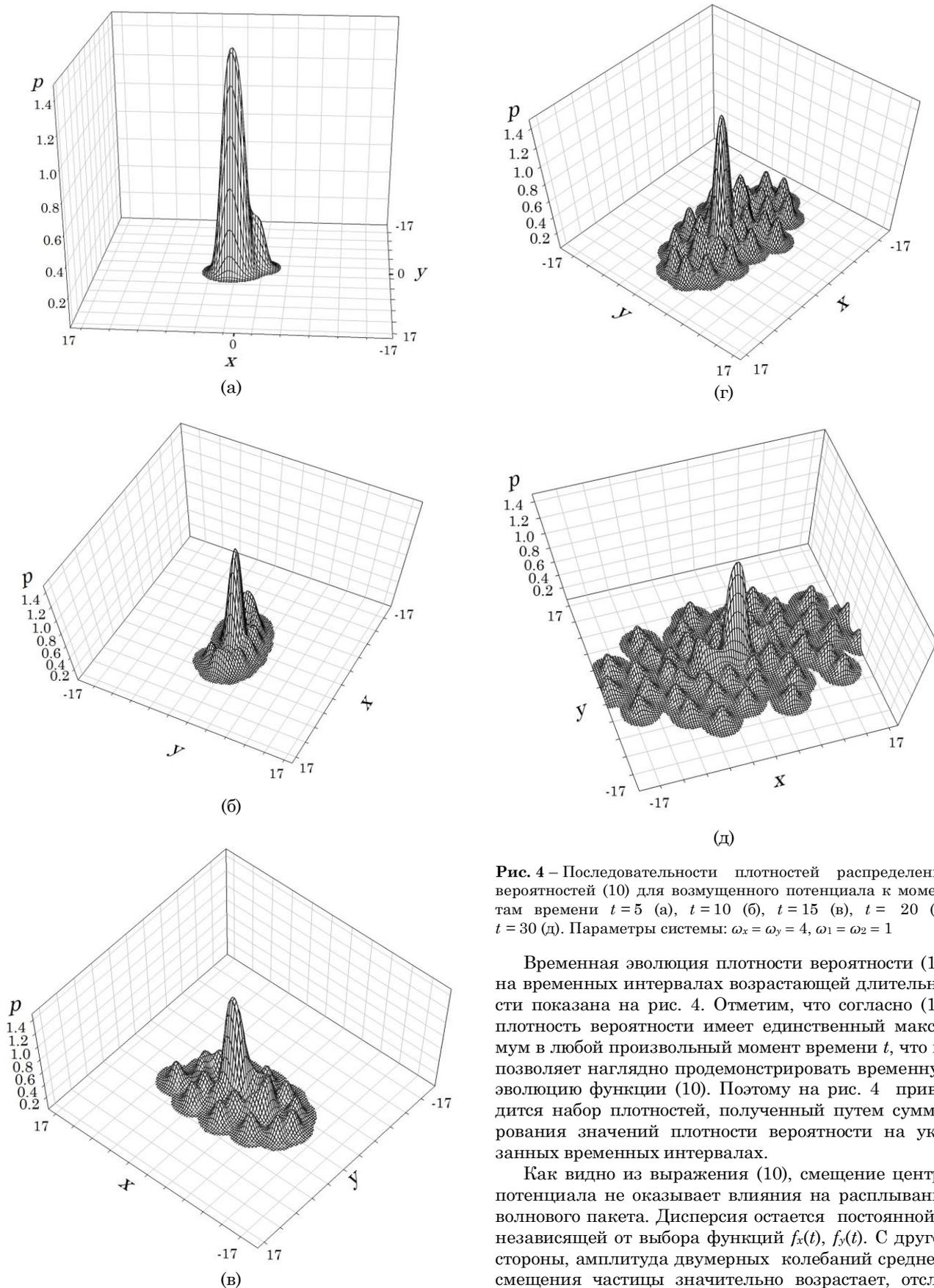


Рис. 4 – Последовательности плотностей распределения вероятностей (10) для возмущенного потенциала к моментам времени $t = 5$ (а), $t = 10$ (б), $t = 15$ (в), $t = 20$ (г), $t = 30$ (д). Параметры системы: $\omega_x = \omega_y = 4$, $\omega_1 = \omega_2 = 1$

Временная эволюция плотности вероятности (10) на временных интервалах возрастающей длительности показана на рис. 4. Отметим, что согласно (10) плотность вероятности имеет единственный максимум в любой произвольный момент времени t , что не позволяет наглядно продемонстрировать временную эволюцию функции (10). Поэтому на рис. 4 приводится набор плотностей, полученный путем суммирования значений плотности вероятности на указанных временных интервалах.

Как видно из выражения (10), смещение центра потенциала не оказывает влияния на расплывание волнового пакета. Дисперсия остается постоянной и независимой от выбора функций $f_x(t)$, $f_y(t)$. С другой стороны, амплитуда двумерных колебаний среднего смещения частицы значительно возрастает, отслеживая влияние функций $f_x(t)$, $f_y(t)$. На резонансных частотах рост амплитуды среднего смещения части-

цы становиться существенным. Исходя из рис. 4 и рис. 3б делаем вывод, что геометрия возможных положений частицы будет определяться, в основном, видом возмущающих функций.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Решение начально-краевой задачи в одномерном случае

Будем искать решение уравнения

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x - f(t))^2 \Psi \quad (A.1)$$

в виде

$$\Psi(x, t; x_0, t_0) = \exp[Q_0(t) + Q_1(t)x + Q_2(t)x^2]. \quad (A.2)$$

В силу единственности решения начально-краевой задачи, построенная таким образом функция будет искомым решением, если функции $Q_0(t)$, $Q_1(t)$, $Q_2(t)$ ($Q_2(t) < 0$) выбираются таким образом, чтобы удовлетворить уравнению Шредингера и начальному условию. Подставляя производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi &= \left(\frac{d}{dt} Q_0(t) + x \frac{d}{dt} Q_1(t) + x^2 \frac{d}{dt} Q_2(t) \right) \Psi, \\ \frac{\partial}{\partial x} \Psi &= (Q_1(t) + 2xQ_2(t)) \Psi, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi &= [(Q_1(t) + 2xQ_2(t))^2 + 2Q_2(t)] \Psi, \end{aligned}$$

в исходное уравнение, имеем

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} (\dot{Q}_0(t) + x\dot{Q}_1(t) + x^2\dot{Q}_2(t)) &= \frac{1}{2} m \omega^2 (x - f(t))^2 - \\ &- \frac{\hbar^2}{2m} [(Q_1(t) + 2xQ_2(t))^2 + 2Q_2(t)]. \end{aligned}$$

Вследствие требования тождественного совпадения получающихся в правой и левой частях уравнения квадратных трёхчленов, получаем следующую систему трёх обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $Q_0(t)$, $Q_1(t)$, $Q_2(t)$.

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \dot{Q}_0 &= \frac{1}{2} m \omega^2 f^2 - \frac{\hbar^2}{2m} [Q_1^2 + 2Q_2], \\ \frac{\hbar}{i} \dot{Q}_1 &= -m \omega^2 f - \frac{2\hbar^2}{m} Q_1 Q_2, \\ \frac{\hbar}{i} \dot{Q}_2 &= \frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{2\hbar^2}{m} Q_2^2. \end{aligned} \quad (A.3)$$

Начальное условие для полученной системы уравнений найдем, приравняв Фурье-образы функций $\Psi(x, t_0, x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$ (начальное условие для (A.1)) и (A.2) при $t \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx &= e^{-ikx_0}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp[Q_0 + xQ_1 + x^2Q_2] e^{-ikx} dx &= \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{|Q_2|}} \exp\left[Q_0 - \frac{(Q_1 - ik)^2}{4|Q_2|}\right]. \end{aligned}$$

В результате получим условие

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi}{|Q_2|} \right) + Q_0 - \frac{(Q_1 - ik)^2}{4|Q_2|} \right) = -ikx_0.$$

Система уравнений (A.3) допускает расщепление искомым функций – путем разделения переменных решается уравнение для $Q_2(t)$, затем решается линейное уравнение для $Q_1(t)$ и, наконец, интегрированием на основе найденных функций вычисляется $Q_0(t)$. В результате, получаем решение уравнения (A.1).

Dynamics of Quantum Particles in Perturbed Parabolic 2d Potential

A.S. Mazmanishvili¹, I.A. Knyaz²

¹ NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology", 1, Academicheskaya st., 61108 Kharkov, Ukraine
² Sumy State University, 2, Rimsky-Korsakov st., 40007 Sumy, Ukraine

2d quantum-mechanical problem of the time evolution of a particle in a quadratic potential is studied. We suppose that the center of the potential is displaced in arbitrary way in time. An analytical expression for the wave function in arbitrary instant time was built. It is shown the dynamic shift of the center of the potential doesn't change the variance. Moreover, the system can exhibit the resonance: when the frequency of the potential perturbation approaches to the natural frequency the amplitude of the wave packet of particle is increased.

Keywords: Quantum particle, Schrödinger equation, Perturbed potential.

Динаміка квантової частинки у збуреному двовимірному параболічному потенціаліО.С. Мазманішвілі¹, І.О. Князь²¹ ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут», вул. Академічна, 1, 61108 Харків, Україна² Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

В роботі розглянута двовимірна квантово-механічна задача про часову еволюцію частинки у квадратичному потенціалі, центр якого зсувається довільним чином у часі. Для довільного моменту часу побудований явний вид хвильової функції. Знайдено, що динамічний зсув центру параболічного потенціалу не призводить до зміни дисперсії. Показано, що в системі можлива реалізація резонансу, при якому збіг частоти збурення із власною частотою призводить до наростання амплітуди коливань хвильового пакету частинки.

Ключові слова: Квантова частинка, Рівняння Шредінгера, Збурений потенціал.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. U. Mizutani, *Introduction to the Electron Theory of Metals* (Cambridge University Press: 2001).
2. F. Duan, J. Guojun, *Introduction to Condensed Matter. Phys. Volume 1* (World Scientific: 2005).
3. T. Asch, P. Duclos, P. Exner, *Math. Res.* **100**, 10 (1996).
4. E.V. Chulkov, V.M. Sillcin, P.M. Echenique, *Surf. Sci.* **391**, 1217 (1997).
5. R. Carles, *Math. Models Methods Appl. Sci.* **12**(2), 1513 (2002).
6. S. M. Ikhdair, R. Sever, *Centr. Europ. J. of Phys.* **5**(4), 516 (2007).
7. Wei-Ping Zhong, Milivoj R. Belić, Tingwen Huang, *Optik* **124**(16), 2397 (2013).
8. V. M. Zhuravlev, V. M. Morozov, *University proceedings. Volga region. Phys. and Mathem. Sci.* **3**(31), 159 (2014)
9. I. I. Cotaescu, P. Gravila, M. Paulescu, *Int. J. Mod. Phys. C* **19**, 1607 (2008).
10. F. Iacob, *Centr. Eur. J. Phys.* **12**, 628 (2014).
11. F. Iacob, M. Lute, *J. Math. Phys.* **56**, 121501 (2015).
12. Wei-Ping Zhong, Milivoj Belić, and Yiqi Zhang, *Optic. Express* **23**(3), 3708 (2015).