

УДК 621.384.6

В.И. ДУБИНКО, А.С. МАЗМАНИШВИЛИ

Национальный Научный Центр «ХФТИ» НАНУ

Д.В. ЛАПТЕВ

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАНУ

КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ДВУМЕРНОМ НЕСТАЦИОНАРНОМ ПАРАБОЛИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Рассмотрено движение волновой функции частицы в параболическом потенциале, центр которого произвольным образом изменяется во времени. Построены одномерная и двумерная функции Грина эволюционного уравнения Шредингера. Для выбранных видов возмущения потенциала приведены примеры эволюции волновой функции.

Ключевые слова: уравнение Шредингера на плоскости, параболический потенциал, эволюция волновой функции.

В.І. ДУБИНКО, О.С. МАЗМАНІШВІЛІ

Національний Науковий Центр «ХФТІ» НАНУ

Д.В. ЛАПТЕВ

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАНУ

КВАНТОВА ДИНАМІКА ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ У ДВОВИМІРНОМУ НЕСТАЦІОНАРНОМУ ПАРАБОЛІЧНОМУ ПОТЕНЦІАЛІ

Розглянуто рух хвильової функції частинки в параболическом потенциале, центр якого довільним чином змінюється з часом. Побудовані одномерна і двовимірна функції Гріна еволюційного рівняння Шредингера. Для обраних видів збурення потенціалу наведені приклади еволюції хвильової функції.

Ключові слова: рівняння Шредингера на площині, параболический потенциал, еволюція хвильової функції.

V.I. DUBINKO, A.S. MAZMANISHVILI

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology" NASU

D.V. LAPTEV

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering NASU

QUANTUM DYNAMICS OF WAVE FUNCTIONS IN A TWO-DIMENSIONAL NONSTATIONARY PARABOLIC POTENTIAL

Evolution of the wave function of a quantum particle in a two-dimensional parabolic potential with a center changing its place in time. One and two-dimensional Green functions for the corresponding Schrödinger equation are derived. Some examples of the wave function evolution are presented for the cases important for practical applications.

Keywords: Schrödinger equation on the plane, parabolic potential, wave function evolution.

Постановка задачи

Рассматривается квантово-механическая задача о движении частицы в квадратичном потенциале, центр которого произвольным образом изменяется во времени и описывается заданной квадратично-интегрируемой функцией $f(t)$. Подобная постановка возникает в задачах, когда смещение $f(t)$ представляет собой траекторию одномерного или двумерного процесса, моделирующего изменения потенциала при движении частицы. Такое положение реализуется, в частности, при движении электрона вдоль кристаллической оси [1, 2]. В этом случае роль времени t в задаче играет глубина проникновения частицы, а функция же $f(t)$, описывающая смещение центра тяжести, описывает случайные или вынужденные колебания кристаллической решетки. Другой важный пример связан с вычислением скорости химической реакции вблизи локализованных ангармонических вибраций атомов, вызванных термическими флуктуациями или внешним воздействием [3, 4]. В этом случае, вследствие большой амплитуды локализованных ангармонических вибраций, положение центра потенциальной ямы, в которой находится частица, уже не может считаться неподвижным, что требует пересмотра задачи о вычислении волновой функции с учетом динамики центра потенциальной ямы.

Задача о динамике волновой функции в одномерном возмущенном параболическом потенциале была рассмотрена в [5]. В настоящей работе изучен двумерный случай, когда центр потенциальной ямы подвержен двумерным возмущениям на плоскости. Построена двумерная функция Грина эволюционного уравнения Шредингера в аналитическом виде. Для выбранного вида возмущения потенциала приведен пример эволюции волновой функции.

Одномерный случай

Математически в одномерном случае постановка задачи состоит в следующем. Для заданных частоты ω_x и функции $f_x(t)$ потенциал $V(t)$ имеет вид

$$V(t) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 [x - f_x(t)]^2. \tag{1}$$

Пусть далее $G_x(x, t; x_0, t_0)$ – квадратично-интегрируемая функция, которая подчинена уравнению Шредингера (\hbar – постоянная Планка, m – масса частицы)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} G_x = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G_x + \frac{1}{2} m \omega_x^2 [x - f_x(t)]^2 G_x \tag{2}$$

и удовлетворяет начальному условию $G_x(x, t_0; x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$.

Функция $G_x(x, t; x_0, t_0)$ является функцией Грина уравнения (2). С точки зрения квантовой механики эта функция представляет собой амплитуду вероятности перехода из состояния в момент времени $t = t_0$, характеризуемого координатой x_0 , в состояние в момент t , характеризуемое координатой x .

Можно убедиться, что если решение уравнения (2) имеет гауссов вид для выбранного момента времени, то его гауссова форма относительно переменной x сохранится для любого другого момента времени. Поэтому будем искать решение уравнения (2) в виде

$$G_x(x, t; x_0, t_0) = \exp[C_0(t) + x C_1(t) + x^2 C_2(t)]$$

с некоторыми зависящими от времени функциями $C_0(t), C_1(t), C_2(t)$. Эти функции выбираются так, чтобы удовлетворить уравнению Шредингера и начальному условию. В силу единственности начально-краевой задачи, построенная таким образом функция будет искомым решением. Подстановка функции G_x в уравнение (2) приводит к выражению:

$$i\hbar(\dot{C}_0(t) + x \dot{C}_1(t) + x^2 \dot{C}_2(t)) = \frac{\hbar^2}{2m} [(C_1(t) + 2x C_2(t))^2 + 2C_2(t)] - \frac{1}{2} m \omega_x^2 [x - f_x(t)]^2.$$

Требование тождественного совпадения получившихся в правой и левой частях этого выражения квадратных трехчленов, приводит к следующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений для вспомогательных функций $C_0(t), C_1(t)$ и $C_2(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{C}_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} (2C_2 + C_1^2) - \frac{1}{2} m \omega_x^2 f_x^2(t), \\ i\hbar \dot{C}_1 &= \frac{2\hbar^2}{m} C_1 C_2 + m \omega_x^2 f_x(t), \\ i\hbar \dot{C}_2 &= \frac{2\hbar^2}{m} C_2^2 - \frac{1}{2} m \omega_x^2. \end{aligned} \tag{3}$$

Система уравнений для функций $C_0(t), C_1(t)$ и $C_2(t)$ элементарно решается ввиду того, что допускает расщепление искомым функций. В результате приходим к решению уравнения (2):

$$\begin{aligned} G_x(x, t; x_0, 0) &= \left(\frac{m \omega_x e^{i \omega_x t}}{\pi \hbar (1 - e^{-2i \omega_x t})} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{m \omega_x}{2 \hbar} (x^2 - x_0^2) + i \frac{m \omega_x}{2 \hbar} \int_0^t f_x^2(\tau) d\tau \right) \times \\ &\times \exp \left(-i \frac{\hbar}{2m} \int_0^t F_x^2(\tau) d\tau + x F_x(t) + \frac{m \omega_x}{\hbar (1 - e^{-2i \omega_x t})} \left[x - e^{-i \omega_x t} x_0 - i \frac{\hbar}{m} e^{-i \omega_x t} \int_0^t F_x(\tau) e^{i \omega_x \tau} d\tau \right]^2 \right), \end{aligned} \tag{4}$$

где

$$F_x(t) = -i \frac{m \omega_x^2}{\hbar} \exp(i \omega_x t) \int_0^t f_x(\tau) \exp(-i \omega_x \tau) d\tau. \tag{4a}$$

Решение уравнения (2) с произвольным начальным условием $\psi(x_0, 0)$ в момент $t = 0$ находится на основе найденной функции Грина по формуле, аналогичной формуле Смолуховского-Колмогорова. В частности, после вычисления интеграла с ядром $G_x(x, t; x_0, 0)$ и начальной волновой функцией

$$\psi(x_0, 0) = \left(\frac{m \omega_x}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left[- \frac{m \omega_x}{2 \hbar} (x_0 - S_x)^2 \right], \tag{5}$$

центрированной около заданной начальной координаты S_x , получим

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega_x}{2\hbar} \left[x - S_x \cos(\omega_x t) - \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin(\omega_x t - \omega_x \tau) d\tau \right]^2 + i \frac{\omega_x^2}{2\hbar} J_x \right), \quad (6)$$

где J_x – набег фазы результирующей волновой функции к моменту t .

Если при $t=0$ частица находилась в состоянии с волновой функцией (5), то к моменту t для плотности распределения вероятностей $p(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ найдем

$$p(x,t) = \left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m\omega_x}{\hbar} \left[x - S_x \cos(\omega_x t) - \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin[\omega_x(t-\tau)] d\tau \right]^2 \right). \quad (7)$$

Двумерный случай

В случае двух переменных на плоскости можно получить точное решение соответствующего уравнения Шредингера, явный вид которого в таком потенциале и его обобщениях позволяет проанализировать динамику волновых функций и связанных с ней квантовомеханических средних. Далее рассмотрим потенциал

$$V(x,y,t) = \frac{1}{2} m\omega_x^2 [x - f_x(t)]^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 [y - f_y(t)]^2 \quad (8)$$

с собственными частотами ω_x, ω_y и возмущениями $f_x(t), f_y(t)$.

В этом случае для волновой функции (функции Грина) $G = G(x, y, t; x_0, y_0, 0)$ уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} G = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) G + \frac{1}{2} m \left[\omega_x^2 (x - f_x(t))^2 + \omega_y^2 (y - f_y(t))^2 \right] G. \quad (9)$$

Физическое содержание волновой функции G в том, что она описывает амплитуду перехода из состояния в момент $t_0 = 0$, характеризуемого координатами x_0 и y_0 , в состояние в момент t , характеризуемое координатами x и y . Далее примем, что для координат x и y остаются справедливыми уравнения Шредингера парциально для функций Грина $G_x = G_x(x, t; x_0, 0)$ и $G_y = G_y(y, t; y_0, 0)$: Тогда убеждаемся в том, что

$$G(x, y, t; x_0, y_0, 0) = G_x(x, t; x_0, 0) \cdot G_y(y, t; y_0, 0). \quad (10)$$

Используя выражение (4) как x -ю часть функции Грина, аналогично можно (с помощью замены x на y в нужных местах) записать выражение для $G_y(y, t; y_0, 0)$. Объединяя выражения (4) для G_x и G_y , получим

$$\begin{aligned} G(x, y, t; x_0, y_0, 0) &= \left(\frac{m\omega_x e^{i\omega_x t}}{\pi\hbar(1-e^{2i\omega_x t})} \right)^{1/2} \left(\frac{m\omega_y e^{i\omega_y t}}{\pi\hbar(1-e^{2i\omega_y t})} \right)^{1/2} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{m\omega_x}{2\hbar} (x^2 - x_0^2) - \frac{m\omega_y}{2\hbar} (y^2 - y_0^2) + i \frac{m\omega_x^2}{2\hbar} \int_0^t f_x^2(\tau) d\tau + i \frac{m\omega_y^2}{2\hbar} \int_0^t f_y^2(\tau) d\tau \right) \times \\ &\times \exp \left(-i \frac{\hbar}{2m} \int_0^t F_x^2(\tau) d\tau + x F_x(t) + \frac{m\omega_x}{\hbar(1-e^{-2i\omega_x t})} \left[x - e^{-i\omega_x t} x_0 - i \frac{\hbar}{m} e^{-i\omega_x t} \int_0^t F_x(\tau) e^{i\omega_x \tau} d\tau \right]^2 \right) \times \\ &\times \exp \left(-i \frac{\hbar}{2m} \int_0^t F_y^2(\tau) d\tau + y F_y(t) + \frac{m\omega_y}{\hbar(1-e^{-2i\omega_y t})} \left[y - e^{-i\omega_y t} y_0 - i \frac{\hbar}{m} e^{-i\omega_y t} \int_0^t F_y(\tau) e^{i\omega_y \tau} d\tau \right]^2 \right), \end{aligned} \quad (11)$$

при этом

$$F_x(t) = -i \frac{m\omega_x^2}{\hbar} \exp(i\omega_x t) \int_0^t f_x(\tau) \exp(-i\omega_x \tau) d\tau$$

$$F_y(t) = -i \frac{m\omega_y^2}{\hbar} \exp(i\omega_y t) \int_0^t f_y(\tau) \exp(-i\omega_y \tau) d\tau$$
(11a)

Численные результаты и их обсуждение

Пусть при $t = 0$ частица находилась в состоянии с волновой функцией

$$\psi(x_0, y_0, 0) = \left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega_y}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega_x}{2\hbar}(x_0 - S_x)^2 - \frac{m\omega_y}{2\hbar}(y_0 - S_y)^2\right],$$
(12)

с центром в точке (S_x, S_y) . Тогда к моменту t для плотности вероятностей $p(x, y, t) = |\psi(x, y, t)|^2$ найдем

$$p(x, y, t) = \left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{m\omega_y}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{m\omega_x}{\hbar} \left[x - S_x \cos(\omega_x t) - \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin[\omega_x(t - \tau)] d\tau\right]^2 - \frac{m\omega_y}{\hbar} \left[y - S_y \cos(\omega_y t) - \omega_y \int_0^t f_y(\tau) \sin[\omega_y(t - \tau)] d\tau\right]^2\right]$$
(13)

Действие смещения потенциала на волновую функцию можно видеть на примере квантово-механических величин (среднего значения координат, дисперсии) и её общего вида.

Первые моменты плотности распределения $p(x, y, t)$ следующие

$$\langle x(t) \rangle = S_x \cos(\omega_x t) + \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin[\omega_x(t - \tau)] d\tau,$$

$$\langle y(t) \rangle = S_y \cos(\omega_y t) + \omega_y \int_0^t f_y(\tau) \sin[\omega_y(t - \tau)] d\tau,$$
(14)

а соответствующие им дисперсии

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_x}, \quad \langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_y}.$$
(15)

Формула (15) показывает, что смещение центра не влияет на расплывание гауссового волнового пакета. Стартуя из точки (S_x, S_y) , центр отслеживает возмущающее действие двумерного фактора $(f_x(t), f_y(t))$ согласно (11a). Также из (14) видно, что возможен эффект резонанса. Если $f_x(t)$ или $f_y(t)$ выбраны с частотой, близкой к соответствующей собственной частоте волновой функции, связанной с потенциалом $V(x, y, t)$, то будет иметь место линейное нарастание амплитуды колебаний центра пакета. Например, при $f_x(t) = 2A \cos(\omega_x t)$ имеем $\langle x(t) \rangle = S_x \cos(\omega_x t) + A \omega_x t \sin(\omega_x t)$ и аналогично для $\langle y(t) \rangle$, т.е. наличие гармоники в вынуждающей силе приводит к неограниченному размаху колебаний пакета как целого.

Рассмотрим пример функций, возмущающих центр потенциала, следующего вида $f_x(t) = \sin(1.002\omega_x t)$, $f_y(t) = 1.5 \cos(0.998\omega_y t)$. В качестве начального условия принято, что центр пакета находится в начале координат, $S_x = S_y = 0$. Расчеты выполнены для интервала $0 \leq t \leq 15$, при этом было принято $\hbar = m = 1$.

На рис. 1 приведены функции возмущения $f_x(t), f_y(t)$.

На рис. 2 показаны отклики $\Phi_x(t) = \omega_x \int_0^t f_x(\tau) \sin[\omega_x(t - \tau)] d\tau$ и $\Phi_y(t) = \omega_y \int_0^t f_y(\tau) \sin[\omega_y(t - \tau)] d\tau$, описывающие смещение центра волнового пакета согласно (14) при $\omega_x = \omega_y = 1$.

На рис. 3 приведена фазовая карта откликов $\Phi_x(t)$ и $\Phi_y(t)$.

На рис. 4 показана последовательность из 40 плотностей распределения вероятностей $p(x, y)$ на временном интервале $0 \leq t \leq 15$ для моментов времени, взятых с шагом $\Delta t = 0.36$.

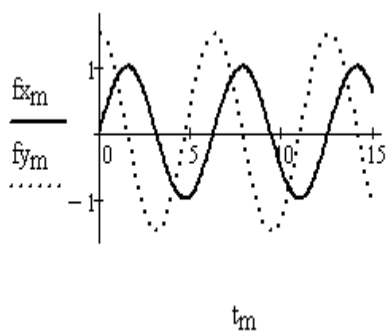


Рис. 1. Воздействие $f_x(t), f_y(t)$

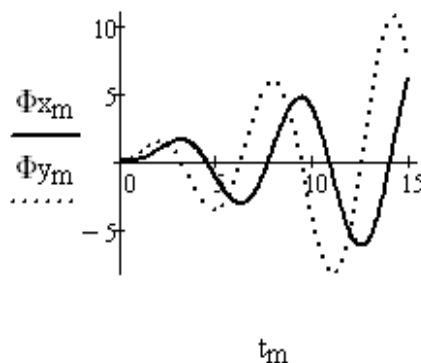


Рис. 2. Движение центра волнового пакета $\Phi_x(t), \Phi_y(t)$

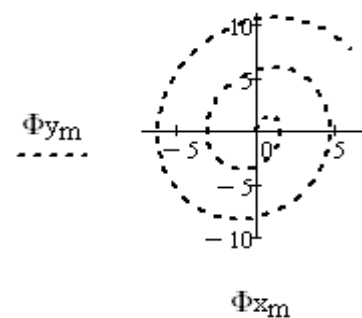


Рис. 3. Фазовая карта центра эволюции волнового пакета $\Phi_x(t), \Phi_y(t)$

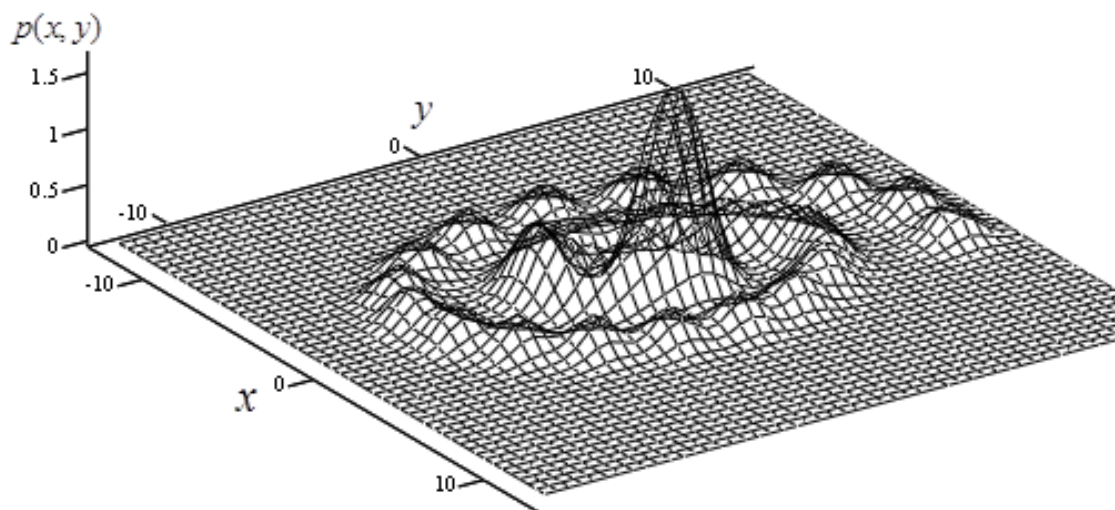


Рис. 4. Эволюция плотности распределения вероятностей

Выводы

В работе рассмотрен двумерный параболический потенциал, центр которого произвольным образом возмущается с течением времени, и движение волновой функции частицы в нем. Построено аналитическое выражение для решения уравнения Шредингера в одномерном и двумерном случае. Проанализирована эволюция волновой функции частицы. Приведен численный пример.

Список использованной литературы

1. Соколов А.А., Лоскутов Ю.Т., Тернов И.М. Квантовая механика / М.: Наука, 1962. – 581 с.
2. Ахиезер А.И. Электродинамика высоких энергий в веществе / М.: Наука. 1993. – 344 с.
3. Dubinko V.I., Selyshchev P.A., Archilla J.F.R. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity, Phys. Rev. E 83 (4), 2011. – 041124-13.
4. Барышевский В.Г. Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях / Минск: Изд-во БГУ, 1982. – 256 с.
5. Мазманишвили А.С. Континуальное интегрирование как метод решения физических задач / К.: Наукова Думка, 1987. – 224 с.