DOI: 10.18698/1812-3368-2015-6-40-45

УДК 530.145.1:530.145.6:530.145.61

ДВИЖЕНИЕ МИКРОЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С ПОДВИЖНОЙ СТЕНКОЙ

Н.И. Юрасов, **Л.К. Мартинсон**

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация
e-mail: nikyurasov@yandex.ru

Рассмотрена задача о движении квантовой частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с непроницаемыми стенками. В отличие от стандартной постановки рассмотрена яма, одна из стенок которой имеет координату $x = 0$ и неподвижна, а другая стенка в момент времени $t = 0$ начинает движение, при котором ширина ямы изменяется в пределах значений $a \dots b$. За счет движения стенки возникает нестационарное состояние микрочастицы. Получены энергетический спектр и волновая функция для этого состояния.

Ключевые слова: потенциальная яма, подвижная стенка, микрочастица, волновая функция, энергетический спектр, переменная амплитуда.

MICROPARTICLE MOVEMENT IN ONE-DIMENSIONAL SQUARE POTENTIAL WELL WITH MOBILE WALL

N.I. Yurasov, **L.K. Martinson**

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation
e-mail: nikyurasov@yandex.ru

The paper considers a problem of quantum particle movement in the one-dimensional square potential well with impermeable walls. As opposed to the standard approach, the authors consider a well with a fixed wall which has a coordinate $x = 0$ while the other wall starts moving at the moment $t = 0$. The well width changes within the limits $a \dots b$. Due to the wall movement, a microparticle state becomes unsteady. Both a power spectrum and a wave function are determined for this state.

Keywords: potential well, mobile wall, microparticle, wave function, power spectrum, variable amplitude.

Введение. Рассмотрим вопрос о качественном изменении энергетических уровней микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме с непроницаемыми стенками. Этого изменения можно достигнуть, например, введением такого силового поля, что вызываемое им расщепление уровней сопоставимо с расстоянием между соседними уровнями [1]. В двухмерных задачах с такими ямами используется изменение их геометрической формы, введение параметра, изменяющего тип граничных условий [2, 3], при этом стенки неподвижны. Это допущение характерно для стандартной квантовой механики [4, 5]. Новые направления применения квантовой механики для анализа многочастичных систем в конечных объемах — метод функционалов плотности [6–9], модель спин-орбитальных кластеров [10–12] — либо принимают это допущение [6–9], либо допускают возможность изменения объема во времени [10–12]. Поэтому авторами настоящей работы была проанализирована задача временно́й эволюции непроницаемой границы одномерной прямоугольной потенциальной ямы.

Постановка задачи. Рассмотрим одномерную прямоугольную потенциальную яму с непроницаемыми стенками. Пусть левая стенка $x = 0$ неподвижна, а правая стенка начинает перемещаться в момент времени $t = 0$ из положения $x = a$ и при $t > 0$ совершает движение по закону

$$b(t) = a\eta(t), \tag{1}$$

где $\eta(t)$ — заданная безразмерная координата движущейся стенки; $x = b$ — текущее положение стенки; в начальный момент времени частица находится в n-м стационарном состоянии, соответствующем ширине ямы, равной a. Введем безразмерную координату микрочастицы в яме $\xi = \pi x/a$ и безразмерное время $\tau = E_1 t/\hbar$. Здесь $E_1 = \dfrac{(\pi\hbar)^2}{2ma^2}$ — энергия микрочастицы в основном состоянии в момент времени $t = 0$; $2\pi\hbar = h$ — постоянная Планка; m — масса микрочастицы. Нестационарное уравнение Шредингера, описывающее движение микрочастицы, во введенных координатах принимает вид

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\tau} = i\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2}, \tag{2}$$

где $\Psi = \Psi(\xi, \tau)$ — волновая функция микрочастицы.

Уравнение (2) следует решать при выполнении граничных условий $\Psi(0, \tau) = 0 \bigcup \Psi(\pi\eta(\tau), \tau) = 0$ и начального условия $\Psi(\xi, 0) = \Psi_n(\xi) = \left(\dfrac{2}{a}\right)^{1/2} \sin(n\xi)$, $n = 1, 2, 3, \ldots$, т.е. в начальный момент времени микрочастица находится в n-м стационарном состоянии, соответствующем ширине ямы a.

Исходная волновая функция. Решение задачи проведем, выбрав определенное значение квантового состояния с номером n, т.е. полагая $\Psi(\xi, \tau) \equiv \Psi_n(\xi, \tau)$. Если правая стенка неподвижна, то волновая функция частицы имеет следующий вид:

$$\Psi_n(\xi, \tau) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin(n\xi)\exp(-in^2\tau). \tag{3}$$

Форма поиска решения уравнения Шредингера. Сохраняя классификацию решений уравнения Шредингера, получаем решение в форме

$$\Psi_n(\xi, \tau) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\xi}{\eta}\right)\left(\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\right) g(\xi, \tau), \tag{4}$$

где $g(\xi,\tau)$ — неизвестная функция координат и времени. Для упрощения поиска решения были введены обозначения

$$s=\sin\left(\frac{n\xi}{\eta}\right),\ f=\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau,\ g=g(\xi,\tau),\Psi_n=\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}s(\exp(-if))g, \quad (5)$$

а также учтены линейные зависимости

$$\begin{gathered} s\propto\sin\frac{n\xi}{\eta};\quad \frac{\partial s}{\partial\tau}\propto\xi n\left(\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\frac{1}{\eta}\right)\right)\cos\frac{n\xi}{\eta}; \\ \frac{\partial s}{\partial\xi}\propto\left(\frac{n}{\eta}\right)\cos\frac{n\xi}{\eta};\frac{\partial^2 s}{\partial\xi^2}\propto\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\sin\frac{n\xi}{\eta}. \end{gathered} \quad (6)$$

Теперь задача сводится к получению уравнения для функции $g(\xi,\tau)$.

Получение уравнения для функции $g(\xi,\tau)$ и его решение. После подстановки волновой функции (4) в каноническое уравнение Шредингера (2), учета формул (5) и (6) и разделения слагаемых, содержащих синус и косинус, была получена следующая система уравнений для неизвестной функции g:

$$i\frac{\partial g}{\partial\tau}+\frac{\partial^2 g}{\partial\xi^2}-\left[2\left(\frac{\tau}{\eta}\right)\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\frac{\partial\eta}{\partial\tau}\right]g=0; \quad (7)$$

$$\frac{\partial g}{\partial\xi}-i\frac{1}{2\eta}\frac{\partial\eta}{\partial\tau}\xi g=0. \quad (8)$$

Решение системы уравнений (7), (8) начнем с анализа уравнения (8). Его решение искалось в виде произведения

$$g(\xi,\tau)=\exp\left(\frac{Q(\tau)\xi^2}{2}+F(\tau)\right), \quad (9)$$

где $Q(\tau),F(\tau)$ — неизвестные функции безразмерного времени. Подставляя (9) в (8), находим функцию $Q(\tau)$:

$$Q(\tau)=\frac{i}{2\eta}\left(\frac{\partial\eta(\tau)}{\partial\tau}\right). \quad (10)$$

Здесь $\eta(\tau)$ — закон движения стенки в безразмерной форме согласно формуле (1). После подстановки (9) в (7) с учетом формулы (10) получим уравнение для неизвестной функции $F(\tau)$ и дополнительное условие

$$i\left(\frac{\partial F}{\partial\tau}\right)+\frac{i}{2\eta}\left(\frac{\partial\eta}{\partial\tau}\right)+\tau n^2\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\frac{1}{\eta}\right)^2=0; \quad (11)$$

$$\frac{1}{\eta}\frac{\partial^2\eta}{\partial\tau^2}=0. \quad (12)$$

При этом условие (12) выполняется только для фиксированного закона движения стенки

$$\eta=1+\beta\tau, \quad (13)$$

где безразмерную постоянную скорость определяет параметр β. После интегрирования уравнения (11) с учетом условия (13) была получена следующая формула для функции $F(\tau)$:

$$F(\tau) = -\frac{1}{2}\ln(1+\beta\tau) - in^2\frac{\beta\tau^2}{(1+\beta\tau)^2}, \tag{14}$$

которая определяет поправку $\delta \mathrm{E}_n(\tau)$ к энергии частицы $\delta E_n(\tau) = E_1 n^2 \dfrac{\beta\tau}{(1+\beta\tau)^2}$.

Анализ предельных значений функции $\boldsymbol{F(\tau)}$. Функция $Q(\tau)$ не зависит от номера квантового состояния, а функция $F(\tau)$ зависит от номера квантового состояния квадратичным образом согласно формуле (14). Поскольку функция $F(\tau)$ является комплексной, проанализируем пределы вещественной и мнимой частей, в результате получим $\lim(\tau \to 0)\,\mathrm{Re}F(\tau) = 0$, $\lim(\tau \to \infty)\,\mathrm{Re}F(\infty) = -\infty$; $\lim(\tau \to 0)\,\mathrm{Im}\left(\dfrac{\mathrm{Im}F(\tau)}{\tau}\right) = 0$, $\lim(\tau \to \infty)\,\mathrm{Im}\left(\dfrac{\mathrm{Im}F(\tau)}{\tau}\right) = 0$.

Изменение энергии частицы с момента начала движения стенки ямы. Энергия частицы вычисляется по формуле

$$E_n = E_1\left(\frac{n}{\eta}\right)^2 + \delta E_n = E_1\left(\frac{n^2}{1+\beta\tau}\right), \tag{15}$$

расстояние между соседними энергетическими уровнями — по формуле

$$E_{n+1} - E_n = \frac{E_1}{1+\beta\tau}(2n+1). \tag{16}$$

Из формулы (15) следует монотонное уменьшение этого расстояния по мере увеличения расстояния между стенками. Из формул (15) и (16) следует, что со временем энергетический спектр частицы преобразуется в сплошной спектр, характерный для свободной частицы.

Анализ амплитуды волновой функции. Согласно совместному рассмотрению формул (4), (9), (10) и (14), установлено, что амплитуда волновой функции при движении стенки с постоянной скоростью приобретает множитель вида $\exp\left(-\dfrac{1}{2}\ln(1+\beta\tau)\right) = \dfrac{1}{(1+\beta\tau)^{1,2}}$, обращающий в ноль амплитуду волновой функции через бесконечно большой промежуток времени от начала движения стенки.

Выводы. Поставлена и решена задача для движения квантовой частицы в прямоугольной яме с непроницаемыми стенками, когда одна из стенок ямы движется с постоянной скоростью. Получено точное решение нестационарного уравнения Шредингера в виде модифицированной волновой функции стационарного уравнения Шредингера.

Определена и исследована временна́я зависимость для энергетического спектра уровней в яме. Найдена и исследована временна́я зависимость изменения модуля амплитуды волновой функции, определяемая законом движения стенки. Доказано, что расстояние между соседними уровнями уменьшается в процессе движения стенки.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Акулин В.М.* Динамика сложных квантовых систем. М.: Физматлит, 2009. 496 с.
2. *Штокман Х.Ю.* Квантовый хаос. М.: Физматлит, 2004. 376 с.
3. *Галицкий В.М.*, *Карнаков В.М.*, *Коган В.В*. Задачи по квантовой механике. В 2 ч. М.: Эдиториал, УРСС, Ч. 1. 2001. 300 с. Ч. 2. 2001. 303 с.
4. *Мартинсон Л.К.*, *Смирнов Е.В.* Квантовая физика. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. 528 с.
5. *Ландау Л.Д.*, *Лифшиц Е.М*. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2004. 800 с.
6. *Еркович О.С*. Метод многочастичных функционалов плотности. Вид функционала кинетической энергии // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2000. № 2 (5). С. 73–79.
7. *Еркович О.С.*, *Пырлин С.В*. Электронный вклад в избыточную энергию наночастиц металлов и сплавов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2009. № 2 (33). С. 38–47.
8. *Руцкая А.М*. Применение методов функционалов плотности при вырождении энергетических уровней в случае систем пониженной размерности // Инженерный журнал: наука и инновации. 2012. № 5 (5). С. 130–134. URL: http://engjournal.ru/articles/213/213.pdf
9. *Еркович О.С*. Структура электронного газа вблизи поверхности металла в присутствии адсорбированных ионов водорода // Инженерный журнал: наука и инновации. 2012. № 5 (5). С. 135–141. URL: http://engjournal.ru/articles/214/214.pdf
10. *Юрасов Н.И.* Спектр ферромагнитного резонанса в металле с коллинеарным магнитным упорядочением // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2000. № 2 (5). С. 64–72.
11. *Юрасов Н.И*. Влияние взаимодействия спиновых и орбитальных магнитных подсистем на спектр магнитных возбуждений в ферромагнитных проводниках // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2007. № 4 (27). С. 3–8.
12. *Yurasov N.I.* FMR in Ferromagnet with Electron Spin-Orbital Clusters // Solid State Phenomena. 2011. Vol. 168–169. P. 109–112.

REFERENCES

[1] Akulin V.M. Dinamika slozhnykh kvantovykh system [Dynamics of Complex Quantum Systems]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2009. 496 p.

[2] Shtokman Kh.Yu. Kvantovyy khaos [Quantum Chaos]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2004. 376 p.

[3] Galitskiy V.M., Karnakov V.M., Kogan V.V. Zadachi po kvantovoy mekhanike. V 2 ch. [Problems in Quantum Mechanics. In 2 parts.]. Moscow, Editorial URSS Publ., Part 1, 2001. 300 p. Part 2, 2001. 303 p.

[4] Martinson L.K., Smirnov E.V. Kvantovaya fizika [Quantum Physics]. Moscow, MGTU im. N.E. Baumana Publ., 2009. 528 p.

[5] Landau L.D., Lifshits E.M. Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya) [Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory)]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2004. 800 p.

[6] Erkovich O.S. Method of multi-partial functionals of density: functional of kinetic energy. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2000, no. 2 (5), pp. 73–79 (in Russ.).

[7] Erkovich O.S., Pyrlin S.V. Electron Contribution into Redundant Energy of Nanoparticles of Metals and Alloys. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2009, no. 2 (33), pp. 38–47 (in Russ.).

[8] Rutskaya A.M. Application of the method of density functional at energy level degeneration in case of systems of reduced dimension. *Jelektr. Nauchno-Tehn. Izd. “Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovacii”* [El. Sc.-Techn. Publ. “Eng. J.: Science and Innovation”], 2012, iss. 5, pp. 130–134. URL: http://engjournal.ru/articles/213/213.pdf

[9] Erkovich O.S. Electron gas structure near the metal surface in the presence of adsorbed hydrogen ions. *Jelektr. Nauchno-Tehn. Izd. “Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovacii”* [El. Sc.-Techn. Publ. “Eng. J.: Science and Innovation”], 2012, iss. 5, pp. 135–141. URL: http://engjournal.ru/articles/214/214.pdf

[10] Yurasov N.I. Ferromagnetic resonance spectrum in metals with collinear magnetic ordering. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2000, no. 2 (5), pp. 64–72 (in Russ.).

[11] Yurasov N.I. Influence of Interaction of Spin and Orbit Magnetic Subsystems on Spectrum of Magnetic Excitements in Ferromagnetic Conductors. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2007, no. 4 (27), pp. 3–8 (in Russ.).

[12] Yurasov N.I. FMR in Ferromagnet with Electron Spin-Orbital Clusters. *Solid State Phenomena*, 2011, vol. 168–169, pp. 109–112.

Статья поступила в редакцию 16.06.2015

Юрасов Николай Ильич — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Yurasov N.I. — Ph.D. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Мартинсон Леонид Карлович — д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Martinson L.K. — D.Sc. (Phys.-Math.), Professor, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Юрасов Н.И., Мартинсон Л.К. Движение микрочастицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с подвижной стенкой // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 6. С. 40–45.

Please cite this article in English as:

Yurasov N.I., Martinson L.K. Microparticle movement in one-dimensional square potential well with mobile wall. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2015, no. 6, pp. 40–45.