

УДК 530.145

ОСОБЕННОСТИ ПРОХОЖДЕНИЯ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОРИСТЫЕ СТРУКТУРЫ

© 2020 г. Г. М. Филиппов^{a, *}, А. С. Сабиров^{b, **},
В. А. Александров^b, А. В. Степанов^{c, ***}

^aЧувашский государственный педагогический университет
имени И.Я. Яковлева, Чебоксары, 428000 Россия

^bЧувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова, Чебоксары, 428015 Россия

^cЧувашская государственная сельскохозяйственная академия, Чебоксары, 428003 Россия

*e-mail: filippov38-gm@yandex.ru

**e-mail: sas731@yandex.ru

***e-mail: for.antonstep@gmail.com

Поступила в редакцию 11.01.2020 г.

После доработки 19.02.2020 г.

Принята к публикации 20.02.2020 г.

Исследуется прохождение волновых пакетов квантовых частиц через пористые структуры в тонких полупрозрачных пленках. Используется численное решение нестационарного уравнения Шредингера в двумерном (для щелей) и трехмерном (круглые отверстия) случаях. Проводится сравнение коэффициента прохождения квантовых частиц со случаем движения классических частиц с тем же распределением плотности. Исследуется вихревое движение плотности потока, имеющее гидродинамическую аналогию. Рассматривается вариант “квантовой каустики” при рассеянии волнового пакета частицы на препятствии.

Ключевые слова: волновой пакет, уравнение Шредингера, вихри вероятностей, численное решение, пористые пленки, коэффициент прохождения.

DOI: 10.31857/S1028096020100052

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе продолжается рассмотрение проникновения потока квантовых частиц через пористую структуру на основе законов квантовой механики (начатое ранее в работе [1]). Специальное внимание уделяется возможности образования вихрей [2–5] в потоке вероятности при прохождении частицы как через отдельную пору в мишени, так и возможное влияние интерференционных явлений при прохождении частицы через систему упорядоченных пор. Возможность вихреобразования следует из представления ротора плотности тока \mathbf{j} в виде векторного произведения:

$$\text{rot } \mathbf{j} = \frac{2\hbar}{m} [\nabla \psi_1 \times \nabla \psi_2],$$

в котором ψ_1 и ψ_2 – соответственно вещественная и мнимая части волновой функции, m и \hbar – масса частицы и постоянная Планка.

МЕТОД РАСЧЕТА

Рассмотрим движение квантово-механической частицы вдоль оси z перпендикулярно тонкой пленке, в которой имеются одна или несколько круглых пор радиуса R . Наряду с этим, рассматривался случай падения волнового пакета на щель в тонкой пленке. Пленка моделировалась как пространственный слой толщины a , в котором задано поле, обладающее постоянным потенциалом величины U_0 . Плоскость xOy проходит через середину слоя, причем центры пор симметрично расположены на оси y . Начальное состояние частицы задается в виде широкого в поперечном направлении пакета, описываемого волновой функцией (ВФ) вида:

$$\Psi = \exp(ip_x x) \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right],$$

где x_0 – координата центра пакета, σ_x , σ_y , σ_z – определяют средне-квадратичные ширины пакета по каждому направлению. Далее используются атомные единицы.

Эволюция волнового пакета определялась методом численного решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера (УШ). Важное значение имеет применение таких методов, которые давали бы достаточно точное решение УШ при больших значениях времени. Отметим, что обычные итерационные методы, такие как метод Кранка–Николсона, накапливают существенную погрешность в расчетах эволюции волновой функции. В последнее время получили развитие новые подходы к численному решению УШ при больших временах [6, 7]. Сравнение эффективности различных методов дано в работе [8]. В данной работе для численного решения УШ использовался метод расщепления оператора эволюции. Этот метод предполагает пошаговое выполнение оператора эволюции и основан на разложении Штранга [9] для операторной экспоненты:

$$\exp(-\tau(\hat{A} + \hat{B})) = \exp(-\tau\hat{A}/2) \times \exp(-\tau\hat{B})\exp(-\tau\hat{A}/2) + \delta(\tau^3). \quad (1)$$

Представление (1) имеет погрешность порядка τ^3 . Существуют аналогичные формулы более высокого порядка точности [10], однако в этом случае возрастает трудоемкость вычислений. В работах [11, 12] анализируются погрешности подобных разложений операторной экспоненты.

С учетом (1), разделив кинетическую и потенциальную энергии в гамильтониане, эволюцию ВФ для достаточно малого шага по времени τ можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t + \tau) &= \exp(-i\tau\hat{H}/\hbar)\psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= \exp\left(\frac{i\hbar\tau}{4m}\Delta_r\right)\exp\left(\frac{-i\tau V(\mathbf{r})}{\hbar}\right) \times \\ &\times \exp\left(\frac{i\hbar\tau}{4m}\Delta_r\right)\psi(\mathbf{r}, t) + o(\tau^3). \end{aligned}$$

Вычисление действия операторных экспонент, входящих в это выражение, удобно проводить путем перехода в импульсное представление ВФ:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i\hbar\tau}{4m}\Delta_r\right)\psi(\mathbf{r}, t) &= \\ &= \exp\left(\frac{i\hbar\tau}{4m}\Delta_r\right) \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) \exp(-i\hbar\tau k^2/4m) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Для перехода в импульсное представление и возвращения обратно в координатное использовалось дискретное преобразование Фурье (ДПФ)

с применением алгоритмов быстрого преобразования Фурье (БПФ). При этом эволюция волновой функции рассматривалась на трехмерной прямоугольной области, достаточно большой, чтобы взаимодействие волнового пакета со структурами пленки происходило далеко от границ области решения УШ. Для подавления нефизического отражения на границе области использовался метод поглощающих границ, который состоит в добавлении мнимого дополнительного потенциала в некотором δ -слое вблизи границы сетки.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Мы уделяем внимание отличию закономерностей потока вероятности от потока идеальной жидкости в гидродинамике. В процессе работы нами производилось предварительное исследование возможности возникновения специфического квантового трения и соответствующей вязкости в потоке вероятности.

На рис. 1 и 2 рассмотрен случай прохождения двумерного (цилиндрического) пакета частицы

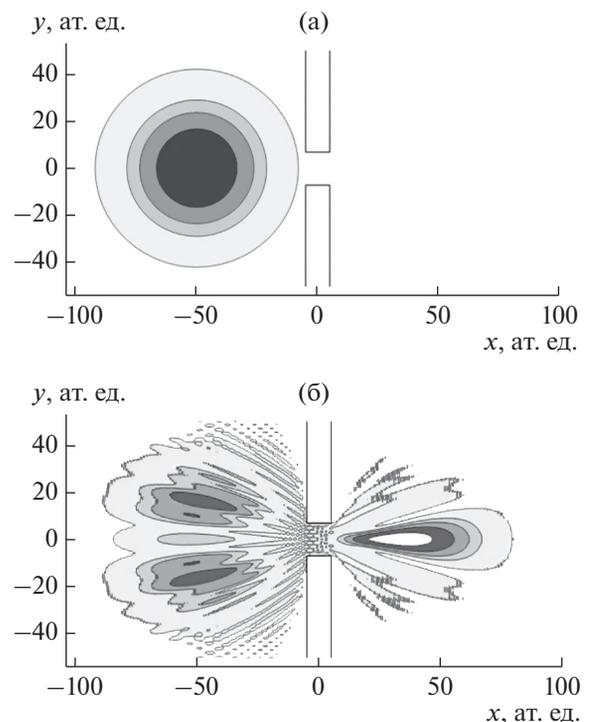


Рис. 1. Эволюция волнового пакета, падающего на плоскую щель в непрозрачной пленке: а – плотность вероятности для налетающего гауссова волнового пакета перед падением на пористую мишень; б – поведение волнового пакета непосредственно после прохождения через щель. Расчет выполнен при значениях параметров: $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 20$, $a = 10$; $p_x = 2$; $U_0 = 100$.

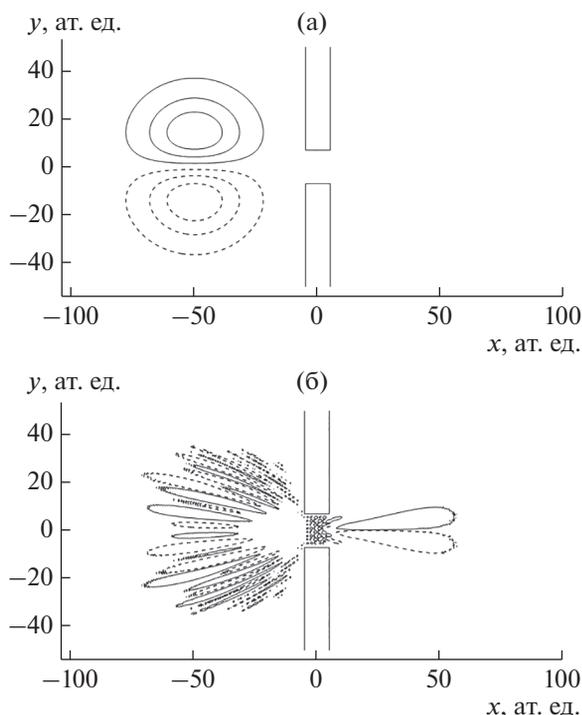


Рис. 2. Распределение проекции ротора плотности тока $(\text{rot } \mathbf{j})_z$ на ось z для случая, представленного на рис. 1а, 1б.

через щель. Плотность распределения вероятности квантовой частицы показана на рис. 1. На рис. 2 приведены результаты расчета проекции ротора $(\text{rot } \mathbf{j})_z$ плотности потока вероятности на ось z , направленную перпендикулярно к плоскости рисунка xOy . Сплошные линии соответствуют положительной, а штриховые — отрицательной проекции. Отметим, что при движении гауссова пакета наблюдаются вихри плотности вероятности. После прохождения через щель (рис. 2б) возникает интерференционная картина с перемежающимися областями положительной и отрицательной проекции $(\text{rot } \mathbf{j})_z$. Аналогичное явление имеет место при движении вязкой жидкости в трубе. Проведенные расчеты для двумерного случая в упрощенном виде демонстрируют наличие вихрей при квантово-механической эволюции плотности вероятности. Аналогичные вихревые явления существуют и в трехмерном случае.

Проводилось сравнение коэффициентов прохождения (рис. 3) через круглую пору в тонкой пленке потоков классических и квантовых частиц. Несмотря на сложный характер эволюции волновой функции, расчеты показывают хорошее согласие интегральных коэффициентов прохождения в обоих рассмотренных случаях.

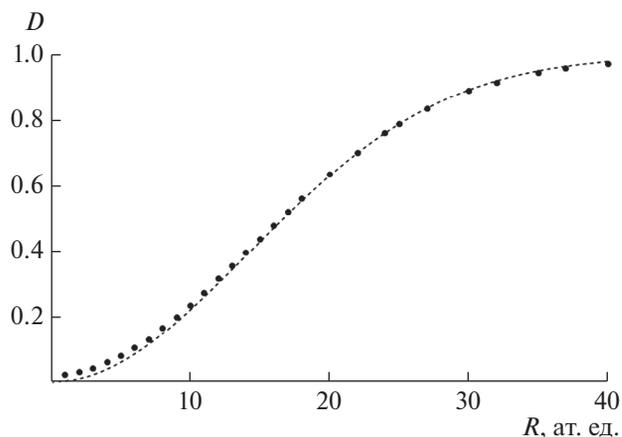


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения D потока частиц через круглую пору в непрозрачной пленке от ее радиуса. Точки — квантовый расчет, пунктир — классический.

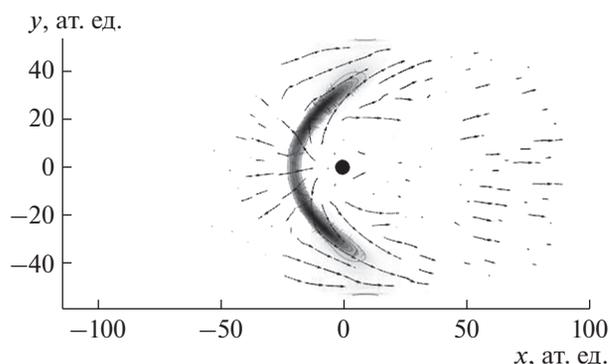


Рис. 4. Распределение плотности вероятности падающего гауссова волнового пакета в процессе рассеяния на модельном потенциале.

Упорядочение потоков вероятности, представленное на рис. 1, невозможно объяснить с точки зрения классической механики.

Нами также проводился расчет рассеяния волнового пакета в двумерном аналоге отталкивающего кулоновского поля. На рис. 4 показаны распределение плотности вероятности и линии тока в момент взаимодействия. Несмотря на отсутствие понятия каустической поверхности в квантовом случае, отчетливо наблюдается характерное сгущение плотности вероятности, которое можно трактовать как квантовый аналог классической каустической поверхности. Более правильно называть данный объект каустической областью, поскольку он не обладает пониженной пространственной размерностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Коэффициент прохождения волнового пакета через круглую пору в рассмотренных случаях согласуется с коэффициентом, рассчитанным “классически”, несмотря на то, что распределения потоков в классическом и квантовом расчетах кардинально различаются во многих деталях.

В специальных “резонансных” случаях остается возможным значительное различие в интегральных вероятностях прохождения квантовых и эквивалентных классических потоков частиц через пористые структуры. Особенно это касается тех случаев, в которых пористая пленка обладает определенной проницаемостью в неперфорированных участках ее поверхности (как для классических, так и для квантовых частиц).

При решении задач об огибании препятствий потоками квантовых частиц полезно вводить понятие о квантовой каустической области, поведение ВФ в которой должно определять некоторые важные физические характеристики, такие как, например, силу, действующую со стороны квантовой волны на препятствие.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Филиппов Г.М., Александров В.А., Лысова И.В., Степанов А.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2018. Т. 82. № 2. С. 210. <https://doi.org/10.7868/S0367676518020151>
2. Madelung E.Z. // Phys. 1927. V. 40. P. 322.
3. Dirac P.A.M. // Proc. R. Soc. London Ser. A. 1931. V. 133. P. 60.
4. Ovchinnikov S.Y., Macek J.H., Schultz D.R. // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. P. 062713. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.062713>
5. Ларионов Н.В., Овчинников С.Ю., Смирновский А.А., Шмидт А.А. // ЖТФ. 2018. Т. 88. № 11. С. 1621. <https://doi.org/10.21883/JTF.2018.11.46621.177-18>
6. Kosloff R. // Annu. Rev. Phys. Chem. 1994. V. 45. P. 145. <https://doi.org/10.1146/annurev.pc.45.100194.001045>
7. Kosloff R. // J. Phys. Chem. 1988. V. 92. P. 2087.
8. Thanh N. Truong, John J. Tanner, Piotr Bala, J. Andrew McCammon, Donald J. Kouri et al. // J. Chem. Phys. 1992. V. 96. № 3. P. 2077. <https://doi.org/10.1063/1.462870>
9. Strang G. SIAM // J. Numer. Anal. 1968. V. 5. P. 506. MR 0235754. <https://doi.org/10.1137/0705041>
10. Bandrauk A.D., Shen H. // Chem. Phys. Letters. 1991. V. 176. № 5. P. 428.
11. Bandrauk A.D., Shen H. // Can. J. Chem. 1992. V. 70. P. 555.
12. Sheng Q. // IMA Journal of Numerical Analysis. 1993. V. 14. P. 27. <https://doi.org/10.1093/imanum/14.1.27>

Features of the Quantum Particle Passage through Porous Structures

G. M. Filippov^{1,*}, A. S. Sabirov^{2,**}, V. A. Aleksandrov², A. V. Stepanov^{3,***}

¹Chuvash State I.Ya. Yakovlev Pedagogical University, Cheboksary, 428000 Russia

²The Chuvash State University named after I.N. Ulyanov, Cheboksary, 428015 Russia

³Chuvash State Agricultural Academy, Cheboksary, 428003 Russia

*e-mail: filippov38-gm@yandex.ru

**e-mail: sas731@yandex.ru

***e-mail: for.antonstep@gmail.com

The passage of wave packets of quantum particles through porous structures in thin semi-transparent films is investigated. The numerical solution of the time depending Schrödinger equation is used in the two-dimensional (for slits) and three-dimensional (round holes) cases. A comparison is made of the transmission coefficient of quantum particles with the case of the motion of classical particles with the same density distribution. We study the vortex motion of the flux density, which has a hydrodynamic analogy. A variant of the “quantum caustic” is considered when scattering the wave packet of a particle on an obstacle.

Keywords: wave packet, Schrödinger equation, probability vortices, numerical solution, porous films, transmission coefficient.