

УДК 621.384.6

В.И. ДУБИНКО, А.С. МАЗМАНИШВИЛИ

Национальный Научный Центр "ХФТИ" НАНУ, 61108, Харьков, Украина

Д.В. ЛАПТЕВ

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАНУ, 61103, Харьков, Украина

## РЕКУРРЕНТНЫЕ АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА ДИНАМИКИ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ВОЗМУЩЕННОМ ПАРАБОЛИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

*Рассмотрено движение волновой функции частицы в параболическом потенциале, который подвержен квадрупольному воздействию, периодически меняющемуся с течением времени. На основе нестационарного уравнения Шредингера построены рекуррентные алгоритмы расчета динамики волновой функции. Приведены асимптотические уравнения движения и их решения, на основе которых получены основные характеристики волнового пакета. Для выбранных видов возмущения потенциала приведены примеры эволюции волновой функции.*

*Ключевые слова: уравнение Шредингера, параболический потенциал, квадрупольное воздействие, эволюция волновой функции.*

V.I. DUBINKO, O.S. MAZMANISHVILI

Национальний Науковий Центр "ХФТИ" НАНУ, 61108, Харків, Україна

D.V. LAPTEV

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАНУ, 61103, Харків, Україна

## РЕКУРРЕНТНІ АЛГОРИТМИ РОЗРАХУНКУ ДИНАМІКИ КВАНТОВОМЕХАНІЧНИХ ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ В ЗБУРЕНОМУ ПАРАБОЛІЧНОМУ ПОТЕНЦІАЛІ

*Розглянуто рух хвильової функції частинки в параболическом потенциале, який збурюється квадрупольним впливом, що періодично змінюється за часом. На основі нестационарного рівняння Шредингера побудовані рекуррентні алгоритми розрахунку динаміки хвильової функції частинки. Наведено асимптотичні рівняння руху та їх розв'язання, на основі яких отримані основні характеристики хвильового пакета. Для обраних видів збурення потенціалу наведені приклади еволюції хвильової функції.*

*Ключові слова: рівняння Шредингера, параболический потенциал, квадрупольний вплив, еволюція хвильової функції.*

V.I. DUBINKO, A.S. MAZMANISHVILI

National Science Center "Kharkov Institute of Physics &amp; Technology" NASU, 61108, Kharkov, Ukraine

D.V. LAPTEV

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering NASU, 61103, Kharkov, Ukraine

## RECURRENT ALGORITHMS FOR CALCULATING THE DYNAMICS OF QUANTUM-MECHANICALS WAVE FUNCTIONS IN THE PERTURBED PARABOLIC POTENTIAL

*The motion of the wave function of a particle in the parabolic potential that is subject to quadrupole action and periodically varying time is considered. On the basis of the nonstationary Schrödinger equation, recurrent algorithms for calculating the dynamics of the wave function are constructed. The asymptotic equations of motion are derived on the basis of which the main characteristics of the wave packet are obtained. Examples of the evolution of the wave function are given for the selected perturbation potentials.*

*Keywords: Schrödinger equation, parabolic potential, quadrupole action, evolution of the wave function.*

### Изложение основного материала

**1. Постановка задачи.** Рассматривается квантово-механическая задача о движении частицы в квадратичном потенциале, который подвержен квадрупольному воздействию, периодически меняющемуся с течением времени. Подобная постановка возникает в задачах, когда возмущение представляет собой траекторию одномерного или двумерного процесса, моделирующего изменения потенциала при движении частицы. Такая же ситуация 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 возмущения, описывает 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 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 параболическом потенциале, подверженном периодическим возмущениям, была рассмотрена в [5]. Настоящая работа посвящена более детальному изучению динамики волнового пакета. На основе нестационарного уравнения Шредингера построены рекуррентные алгоритмы расчета динамики волновой функции. Построены функции Грина эволюционного уравнения Шредингера в аналитическом виде. Приведены асимптотические уравнения движения и их решения, на основе которых получены основные характеристики волнового пакета.

Квадратичный потенциал в квантовой теории имеет важное значение в качестве примера, допускающего точные и пригодные для анализа решения соответствующего уравнения Шредингера. Явные решения в квадратичном потенциале и его обобщениях позволяют проанализировать динамику волновых функций и квантово-механических средних. В настоящей работе будет рассмотрена временная эволюция частицы с исходной волновой функцией

$$\psi(x_0, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\Omega(0)}{2\hbar}x_0^2\right) \quad (1)$$

в потенциале  $V(x_t, t) = m\Omega^2(t)x_t^2/2$ , где  $\Omega(t)$  – некоторая заданная функция. Такого вида потенциал является обобщением параболического потенциала с  $V(x, t) = m\omega^2x^2/2$  с постоянной частотой  $\omega$ . В этом случае для функции Грина  $G = G(x_t, t; x_0, t_0)$  уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_t^2} G + \frac{1}{2} m\Omega^2(t)x_t^2 G. \quad (2)$$

Содержание функции Грина  $G$  в том, что она описывает амплитуду перехода из состояния в момент  $t_k$ , характеризуемого координатой  $x_k$ , в состояние в момент  $t_{k+1}$ , характеризуемого координатой  $x_{k+1}$ .

В работе будет рассмотрен случай параметрического резонанса, когда

$$\Omega^2(t) = \omega_0^2(1 + g \sin(2\omega_0 t)), \quad (3)$$

где  $\omega_0$  – собственная частота,  $g$  – индекс модуляции, достаточно малый по сравнению с 1.

**2. Волновая функция.** В том случае, когда частота постоянна,  $\Omega(t) = const$ , для уравнения (2) удается построить аналитическое выражение в квадратурах. В общем случае зависящей от текущего времени частоты  $\Omega(t)$  для расчета динамики квантово-механических волновых функций в возмущенном потенциале возможно построить рекуррентный алгоритм. Это основано на том, что для любого  $t$  волновая функция  $\psi(x_t, t; x_0, t_0)$  имеет нормальный вид относительно  $x_t$  и  $x_0$ . Поэтому является достаточным построить алгоритм для вычисления первых двух её моментов. Используем явный вид решения уравнения Шредингера с постоянной частотой  $\omega$

$$G(x_t, t; x_0, t_0) = \left(\frac{me^{i\omega t}}{\pi\hbar(e^{2i\omega t} - 1)}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_t^2 - x_0^2) - \frac{m\omega}{\hbar(e^{2i\omega t} - 1)}(x_t - e^{i\omega t}x_0)^2\right) \quad (4)$$

и перепишем его для двух моментов времени  $t_{k-1}$  и  $t_k$ , разделенных достаточно малым промежутком  $\tau$ :

$$G(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) = \left(\frac{mq_k}{\pi\hbar(q_k^2 - 1)}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\Omega_k}{2\hbar}(x_k^2 - x_{k-1}^2) - \frac{m\Omega_k}{\hbar(q_k^2 - 1)}(x_k - q_k x_{k-1})^2\right), \quad (5)$$

где  $q_k = \exp(i\Omega_k \tau)$ ,  $\Omega_k = \Omega(t_k)$  – значения частоты на каждом из временных интервалов.

Значение волновой функции  $\psi(x_k, t_k)$  в момент  $t_k > t_0$  может быть определено по заданному в момент  $t_{k-1}$  её значению  $\psi(x_{k-1}, t_{k-1})$  в соответствии с соотношением

$$\psi(x_k, t_k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_{k-1}, t_{k-1}) G(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) dx_{k-1}. \quad (6)$$

Откуда видно, что можно использовать свойство нормальности и ограничиться первыми двумя моментами. Поскольку  $\langle x_k \rangle_{\psi} = 0$  для всех  $k$ , то

$$\psi(x_k, t_k) = N \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2s_{k-1}^2}x_{k-1}^2 - \frac{m\Omega_k}{2\hbar}(x_k^2 - x_{k-1}^2) - \frac{m\Omega_k}{\hbar(q_k^2 - 1)}(x_k - q_k x_{k-1})^2\right) dx_{k-1}, \quad (7)$$

где  $N$  – нормировка,  $s_{k-1}^2$  – дисперсия волновой функции в момент  $t_{k-1}$ .

Нашей целью является построение рекуррентного соотношения, связывающего дисперсии волновой функции  $s_{k-1}^2$  и  $s_k^2$  для последующих моментов времени. Учитывая, что  $\langle x_{k-1} \rangle_{\psi} = 0$  и  $\langle x_k \rangle_{\psi} = 0$ , получаем  $s_{k-1}^2 = \langle x_{k-1}^2 \rangle_{\psi}$  и  $s_k^2 = \langle x_k^2 \rangle_{\psi}$ . В результате интегрирования получаем следующее основное рекуррентное выражение, связывающее текущую дисперсию  $s_k^2$  с предыдущей дисперсией  $s_{k-1}^2$ :

$$s_k^2 = \frac{1}{\eta_k} \frac{\sin(\Omega_k \tau) + i \eta_k s_{k-1}^2 \cos(\Omega_k \tau)}{i \cos(\Omega_k \tau) + \eta_k s_{k-1}^2 \sin(\Omega_k \tau)}, \quad \eta_k = \frac{m}{\hbar} \Omega_k \equiv \frac{m}{\hbar} \Omega(t_k). \quad (8)$$

Далее будем применять правило модуляции частоты  $\Omega(t)$  в потенциале с течением времени  $t$  согласно соотношению (3). Обозначая  $\xi_k = \eta_{k+1} s_k^2$ , построим на основе (8) разностное выражение

$$\xi_k - \xi_{k-1} = \frac{\Omega_k \tau (1 - \xi_{k-1}^2)}{i} + \frac{\Omega_{k+1} - \Omega_k}{\Omega_k} \xi_{k-1} + O(\tau). \quad (9)$$

Поскольку при малых  $g$  имеем  $(\Omega_{k+1} - \Omega_k) \Omega_{k+1}^{-1} = g \omega_0 \tau \cos(2\omega_0 t_k) + O(g^2)$ , то, переходя к пределу  $\tau \rightarrow 0$ , получаем

$$\frac{d\xi}{dt} = -i\Omega(t)(1 - \xi^2) + g\omega_0 \xi \cos(2\omega_0 t), \quad \xi(0) = \xi_0. \quad (10)$$

Для решения уравнения (10) воспользуемся подстановкой  $\xi = -i \operatorname{tg}(\mu)$ . Это дает

$$-i \frac{d\mu}{dt} = -i\Omega(t) - i \frac{1}{2} g \omega_0 \cos(2\omega_0 t) \sin(2\mu). \quad \mu(0) = \mu_0. \quad (11)$$

Обозначим фазовый интеграл  $\Phi(t) = \int_0^t \Omega(\tau) d\tau$ , тогда можно записать

$$2 \frac{d}{dt} (\mu - \Phi(t)) = g \omega_0 \cos(2\omega_0 t) \sin(2\mu). \quad (12)$$

В этом уравнении выделим справа резонансный член, при этом нерезонансное слагаемое отбросим. После прямого интегрирования найдем первый интеграл с учетом того, что  $\Phi(0) = 0$ ,

$$\mu(t) = -\Phi(t) + \omega_0 t + \operatorname{arctg} \left[ \exp \left( \frac{1}{2} g \omega_0 t \right) \operatorname{tg}(\mu_0) \right]. \quad (13)$$

Поскольку  $\Phi(t) - \omega_0 t = \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) + O(g)$ , то искомая зависимость размера волнового пакета от текущего времени имеет вид

$$s^2(t) = \frac{1}{\eta(t)} \frac{\eta(0) s^2(0) \exp \left( \frac{1}{2} g \omega_0 t \right) + i \operatorname{tg} \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right]}{1 + i \eta(0) s^2(0) \exp \left( \frac{1}{2} g \omega_0 t \right) \operatorname{tg} \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right]}. \quad (14)$$

**3. Характеристики волновой функции.** Примем, что в начальный момент частица находится в основном состоянии с  $s^2(0) = 1$ . На основе выражения (14) для дисперсии  $s^2(t)$  волнового пакета и свойства нормальности можно найти необходимые характеристики волновой функции.

Размер волнового пакета по координате:

$$\langle \mathcal{E} \rangle_\psi = \frac{1}{2\eta_t} \exp \left( -\frac{1}{2} g \omega_0 t \right) \left( \cos^2 \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right] \exp(g \omega_0 t) + \sin^2 \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right] \right). \quad (15)$$

Размер волнового пакета по импульсу:

$$\langle \mathcal{E}_t^2 \rangle_\psi = \frac{\hbar^2 \eta_t}{2} \exp \left( -\frac{1}{2} g \omega_0 t \right) \left( \cos^2 \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right] + \sin^2 \left[ \frac{g}{8} \sin^2(\omega_0 t) \right] \exp(g \omega_0 t) \right). \quad (16)$$

Средняя энергия:

$$W_t = \frac{1}{2m} \langle \mathcal{E}_t^2 \rangle_\psi + \frac{m}{2} \Omega_t^2 \langle \mathcal{E} \rangle_\psi = \frac{\hbar \Omega(t)}{2} \cosh \left( \frac{g \omega_0 t}{2} \right). \quad (17)$$

Коэффициент увеличения средней энергии частицы с течением времени составляет

$$r_t = \frac{W_t}{W_0} = \sqrt{1 + g \sin(2\omega_0 t)} \cosh \left( \frac{1}{2} g \omega_0 t \right). \quad (18)$$

Найденные выражения позволяют для известной функции частоты  $\Omega(t)$  и заданном размере (дисперсии)  $s_0^2$  исходной волновой функции  $\psi(x_0, 0)$  определять последовательность размеров  $s_t^2$  волновых функции  $\psi(x_t, t)$  для произвольного количества периодов вынуждающих колебаний. Внутри каждого из их периодов размер волновой функции по координате испытывает колебания согласно (15), определяемые собственной частотой  $\omega_0$  и индексом модуляции  $g$ . Поскольку волновая функция  $\psi(x_t, t)$  имеет нормальный вид с нулевым средним и дисперсией  $s^2(t)$ , то тем самым полностью определяется

состояние частицы. Средняя энергия частицы испытывает рост по закону гиперболического косинуса, который в отличие от [5] еще испытывает модуляцию с частотой  $\omega_0$ .

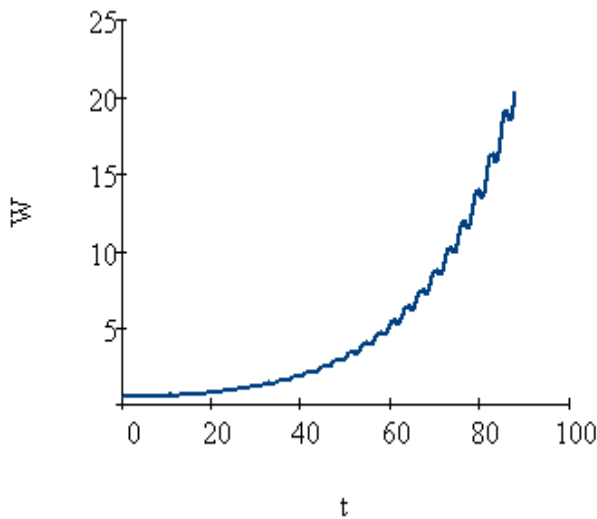


Рис. 1. Зависимость средней энергии  $W$  от текущего времени  $t$ ,  $\omega_0 = 1$ ,  $g = 0,1$

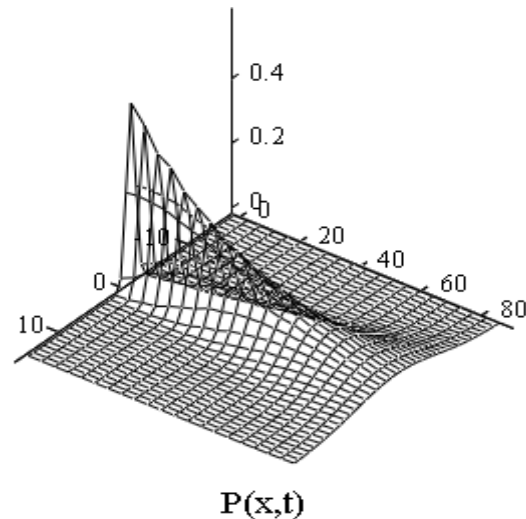


Рис. 2. Плотность распределения вероятностей  $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ ,  $\omega_0 = 1$ ,  $g = 0,1$

На рис. 1 приведена зависимость средней энергии  $W_t$  от текущего времени  $t$  при значениях параметров  $\omega_0 = 1$  и  $g = 0,1$ . Видно, что средняя энергия возрастает, испытывая при этом модуляцию с частотой  $\omega_0$ . Амплитуда этой модуляции, в свою очередь, определяется значением индекса  $g$ .

Временная эволюция плотности распределения вероятностей  $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$  на интервале  $0 \leq t \leq 90$  при тех же значениях параметров  $\omega_0$  и  $g$  показана на рис. 2.

**Выводы**

В работе рассмотрен параболический потенциал, который как целое подвержен квадрупольному воздействию (параметрическому резонансу), периодически меняющемуся с течением времени, и динамика волновой функции частицы в нем. На основе нестационарного уравнения Шредингера построены рекуррентные алгоритмы расчета динамики волновой функции. Проанализирована эволюция волновой функции частицы. Приведены асимптотические уравнения движения, с помощью которых получены основные характеристики волнового пакета. Для выбранных видов возмущения потенциала приведены примеры эволюции волновой функции.

**Список использованной литературы**

1. Соколов А.А. Квантовая механика / А.А. Соколов, Ю.Т. Лоскутов, И.М. Тернов. – М.: Наука, 1962. – 581 с.
2. Ахиезер А.И. Электродинамика высоких энергий в веществе / А.И. Ахиезер, Н.Ф. Шульга. – 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. E83 (4), 2011. – 041124-13.
4. Барышевский В.Г. Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях / В.Г. Барышевский. – Минск: Изд-во БГУ, 1982. – 256 с.
5. Гольдман И.И. Сборник задач по квантовой механике / И.И. Гольдман, В.Д. Кривченков. – М.: Госиздат технико-теоретической литературы, 1957. – 275 с.