DOI: https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.3.1

УДК: 530.145.1:530.145.6:530.145.61

МОДЕЛЬ ПОВЕДЕНИЯ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С ПОДВИЖНОЙ СТЕНКОЙ

А.И. Карцев [1,2], А.А. Сафронов [2], М.И. Махов [3]

[1] Вычислительный центр ДВО РАН
680000, Россия, г. Хабаровск, ул. Ким Ю Чена, д. 65
[2] МИРЭА – Российский технологический университет
119454, Москва, пр-т Вернадского 78
[3] Российский университет дружбы народов
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

Статья поступила в редакцию 5 февраля 2024 г.

Аннотация. В данной работе найдено аналитическое выражение для энергетического спектра в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Одна из стенок с координатой $x = 0$ неподвижна, другая стенка, имеющая в начальный момент времени координату $x = a$, движется с постоянной скоростью. Полученные результаты могут быть использованы для модулирования работы вакуумных наноустройств.

Ключевые слова: потенциальная яма, квантовая частица, энергетический спектр, вакуумный нанотранзистор.

Автор для переписки: Сафронов Александр Аркадьевич, alexsafronov@yandex.ru

Введение

Одной из наиболее актуальных тенденций, в области поиска новых принципов электронных устройств, сочетающих достоинства полупроводниковой электроники и вакуумных электронных приборов является создание перспективных приборы вакуумной наноэлектроники [1-4]. Вакуумные электронные устройства по своей сути превосходят твердотельные электронные устройства с точки зрения высокой скорости, благодаря идеальному баллистическому транспорту без рассеяния и с минимальной диссипацией тепла [3,5,6]. Недавно опубликованы работы о создании наноразмерных транзисторов с вакуумным каналом (НТВК), в которых удалось снизить рабочее напряжение до ≈5 В и время переключение до субпикосекундного масштаба [1-6].

На пути создания принципов новых направлений наноэлектроники на основе НТВК лежит необходимость более глубокого понимания квантовомеханических эффектов, которые проявляются при транспорте носителей заряда в вакуумном промежутке НТВК. Представляет интерес поиск точных аналитических решений для энергетического спектра частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Одной из нерешенных задач в этой области является поиск точного решения для энергетического спектра частицы в случае, когда одна из границ вакуумного промежутка не является неподвижной. Многие работы посвящены исследованиям поведения частиц в потенциальных ямах различной формы [7-10]. Однако, особый интерес представляет поведение квантовых частиц, находящихся в ямах, геометрические размеры которых изменяются с течением времени [11]. Настоящая работа посвящена исследованию поведения квантовой частицы, находящейся в потенциальной яме, ширина которой меняется с постоянной скоростью. Данная задача ранее уже решалась приближенно [12], в настоящей работе представлены результаты поиска ее точного аналитического решения.

1. Постановка задачи

Найти энергетический спектр частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. При этом одна из стенок, имеющая координату $x = 0$ неподвижна, другая стенка, имеющая в начальный момент времени координату $x = a$, движется с постоянной скоростью.

2. Квантовая частица в потенциальной яме с подвижной стенкой

В работе [12] рассматривается частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. При этом одна из стенок, имеющая координату $x = 0$ неподвижна, а вторая стенка, имеющая в начальный момент времени координату $x = a$, движется по закону $x = a\eta(t)$, где $\eta(t)$ – задаваемая безразмерная координата подвижной стенки, равная в начальный момент времени единице. В отличие от задачи с неподвижными стенками потенциальной ямы, движение такой частицы будет описываться нестационарным уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\tau} = i\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2}, \tag{1}$$

где $\xi = \pi x/a$ – безразмерная координата частицы, $\tau = E_1 t/\hbar$ – безразмерное время, E_1 – энергия основного состояния в яме с неподвижными стенками, $\Psi = \Psi(\xi, \tau)$ – волновая функция частицы в безразмерных переменных, удовлетворяющая граничным $\Psi(0, \tau) = \Psi(\pi\eta, \tau) = 0$ и начальному условию $\Psi(\xi, 0) = \psi_n$. Волновая функция $\Psi = \Psi_n(\xi, \tau)$ ищется в виде:

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

После подстановки (2) в (1) и анализа получившихся уравнений находят явный вид функции $g(\xi, \tau)$:

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

где $Q(\tau) = \dfrac{i}{2\eta}\left(\dfrac{\partial\eta}{\partial\tau}\right)$, а $F(\tau) = -\dfrac{1}{2}\ln(1+\beta\tau) - in^2\dfrac{\beta\tau^2}{(1+\beta\tau)^2}$.

При этом функция, описывающая движение подвижной стенки, имеет вид:

$$\eta(\tau) = 1 + \beta\tau, \tag{3}$$

где β – const. Дискретный энергетический спектр частицы, находящейся в потенциальной яме с подвижной стенкой, описывается выражением:

$$E_n = E_1\left(\frac{n^2}{1+\beta\tau}\right). \tag{4}$$

При расчетах мы будем пользоваться заменой переменной:

$$y = \frac{\pi n x}{\eta a}. \tag{5}$$

Кроме того учтем, что:

$$\frac{\partial\eta}{\partial\tau} = \beta,$$

$$Q(\tau) = \frac{i\beta}{2\eta}, \tag{6}$$

$$\exp\left(\frac{Q^*(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right) = 1, \tag{7}$$

$$\exp\left(F^*(\tau) + F(\tau)\right) = \frac{1}{\eta}. \tag{8}$$

Найдем результат действия оператора импульса и квадрата импульса на волновую функцию (2):

$$\hat{p}\Psi_n = -i\hbar\sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\exp\left(F(\tau)\right)\frac{\partial}{\partial x}\left\{\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\right\} =$$

$$= -i\hbar\sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\exp\left(F(\tau)\right)\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\left\{\frac{\pi n}{\eta a}\cos\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right) + \frac{Q(\tau)\pi^2 x}{a^2}\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\right\}.$$

$$\hat{p}^2\Psi_n = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi_n}{\partial x^2} = -\hbar^2\sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(F(\tau)\right)\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\left\{\frac{Q(\tau)\pi^2 x}{a^2}\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\cdot\right.$$
$$\cdot\left(\frac{\pi n}{\eta a}\cos\frac{\pi n x}{\eta a}+\frac{Q(\tau)\pi^2 x}{a^2}\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\right)+\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\left(-\frac{\pi^2 n^2}{\eta^2 a^2}\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)+\right. \quad (9)$$
$$\left.\left.+\frac{Q(\tau)\pi^2}{a^2}\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)+\frac{Q(\tau)\pi^2 x}{a^2}\frac{\pi n}{\eta a}\cos\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\right)\right\}.$$

После преобразования (9) получаем:

$$\hat{p}^2\Psi_n = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi_n}{\partial x^2} = -\hbar^2\sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(F(\tau)\right)\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\cdot$$
$$\cdot\left\{\frac{2Q(\tau)\pi^3 n}{\eta a^3}x\cos\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)+\frac{Q^2(\tau)\pi^4}{a^4}x^2\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)+\left(\frac{Q(\tau)\pi^2}{a^2}-\frac{\pi^2 n^2}{\eta^2 a^2}\right)\sin\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\right\}. \quad (10)$$

Среднее значение квадрата импульса с учетом (10) будет равно:

$$\left\langle p^2\right\rangle = \left\langle \Psi_n\middle|\hat{p}^2\middle|\Psi_n\right\rangle = -\hbar^2\frac{2}{a}\exp\left(F^*(\tau)\right)\exp\left(F(\tau)\right)\exp\left(i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\cdot$$
$$\cdot\exp\left(-i\left(\frac{n}{\eta}\right)^2\tau\right)\int_0^{\eta a}\exp\left(\frac{Q^*(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\exp\left(\frac{Q(\tau)\pi^2 x^2}{2a^2}\right)\left\{\frac{Q(\tau)\pi^3 n}{\eta a^3}x\sin\left(\frac{2\pi n x}{\eta a}\right)+\right. \quad (11)$$
$$\left.+\frac{Q^2(\tau)\pi^4}{a^4}x^2\sin^2\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)+\left(\frac{Q(\tau)\pi^2}{a^2}-\frac{\pi^2 n^2}{\eta^2 a^2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi n x}{\eta a}\right)\right\}dx.$$

Используя (5) – (8) выражение (11) можно записать как:

$$\left\langle p^2\right\rangle = -\hbar^2\frac{2}{a}\frac{1}{\eta}\left\{\frac{i\beta}{2\eta}\frac{\pi^3 n}{\eta a^3}\frac{\eta^2 a^2}{\pi^2 n^2}\int_0^{\pi n} y\sin 2y dy-\frac{\beta^2}{4\eta^2}\frac{\pi^4}{a^4}\frac{\eta^3 a^3}{\pi^3 n^3}\int_0^{\pi n} y^2\sin^2 y dy+\right.$$
$$\left.+\left(\frac{i\beta}{2\eta}\frac{\pi^2}{a^2}-\frac{\pi^2 n^2}{\eta^2 a^2}\right)\frac{\eta a}{\pi n}\int_0^{\pi n}\sin^2 y dy\right\}. \quad (12)$$

После интегрирования и преобразования (12) с учетом (4) получаем энергетический спектр частицы:

$$E_n = \frac{\left\langle p^2\right\rangle}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(\frac{n^2}{(1+\beta\tau)^2}-\frac{\beta^2}{8n^2}+\frac{\pi^2\beta^2}{12}\right). \quad (13)$$

Найденное нами выражение (13) не совпадает с выражением (4), полученным в работе [12]. Исследуем данные выражения в частных случаях. Убедимся в положительности энергетических спектров (4) и (13). Как следует из (13), минимальное значение энергии при $n = 1$ будет больше нуля вне зависимости от знака β:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\left(\frac{1}{(1+\beta\tau)^2} - \frac{\beta^2}{8} + \frac{\pi^2 \beta^2}{12}\right) > 0$$

При отрицательных значениях параметра β (4) может принимать отрицательные значения. Выражение (4) не проходит проверку. Теперь рассмотрим случай, когда $\tau = 0$, а $\beta \neq 0$, т. е. подвижная стенка в нулевой момент времени имеет координату $x = a$ и скорость, отличную от нуля. При таком начальном условии энергетический спектр частицы не должен переходить в энергетический спектр частицы в яме с неподвижными стенками, поскольку правая стенка имеет скорость в начальный момент времени. При $\tau = 0$ и $\beta \neq 0$ формула (13) проходит проверку, а формула (4) нет. Вышеприведенные рассуждения позволяют нам сделать вывод о том, что энергетический спектр частицы в одномерной потенциальной яме с подвижной стенкой описывается не выражением (4), а выражением (13).

Найдем разность двух соседних энергетических уровней. Используя (13), имеем:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n+1)}{2ma^2}\left(\frac{1}{(1+\beta\tau)^2} + \frac{\beta^2}{8n^2(n+1)^2}\right). \tag{14}$$

Как видно из выражения (14), с увеличением расстояния между стенками бесконечно высокой потенциальной ямы разность двух соседних энергетических уровней частицы уменьшается. При $\tau \to \infty$ и $\beta \neq 0$ разность соседних энергетических уровней стремится к:

$$\Delta E_n \to \frac{\hbar^2 \pi^2 \beta^2 (2n+1)}{16ma^2 n^2 (n+1)^2}.$$

Заключение

Найден энергетический спектр частицы в потенциальной яме с подвижной стенкой. Получено выражение для разности двух соседних уровней энергии частицы, находящейся в потенциальной яме с динамически изменяющейся шириной. Так же найдено предельное значение выражения для разности двух соседних уровней энергии в бесконечно большой момент времени.

Результаты данного исследования говорят о возможности модулирования режимов работы НТВК, путем управления границ вакуумного промежутка, что позволит получать устройства с новыми рекордными характеристиками, превосходящие твердотельные аналоги.

Результаты получены с использованием оборудования ЦКП “Дальневосточный вычислительный ресурс” ИАПУ ДВО РАН (https://cc.dvo.ru), а также вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Литература

1. Chen B. et al. Nanoscale air channel devices-inheritance and breakthrough of vacuum tube // Nano Materials Science. – 2024.
2. Samizadeh Nikoo M. et al. Nanoplasma-enabled picosecond switches for ultrafast electronics // Nature. – 2020. – Т. 579. – №. 7800. – С. 534-539.
3. Han J. W., Sub Oh J., Meyyappan M. Vacuum nanoelectronics: Back to the future?–Gate insulated nanoscale vacuum channel transistor // Applied physics letters. – 2012. – Т. 100. – №. 21.
4. Li N. et al. Sub-Picosecond Nanodiodes for Low-Power Ultrafast Electronics // Advanced Materials. – 2021. – Т. 33. – №. 33. – С. 2100874.
5. DI H. J. W. S. M. L. M. Hunter G Meyyappan M Nanoscale vacuum channel transistors fabricated on silicon carbide wafers Nat // Electron. – 2019. – Т. 2. – С. 405-411.

6. Han J. W., Moon D. I., Meyyappan M. Nanoscale vacuum channel transistor // Nano letters. – 2017. – Т. 17. – №. 4. – С. 2146-2151.
7. Nguyen D. H. Influence of the confining potential on the linewidth of a quantum well. Superlattices and Microstructures. 2021. V.160. P.107068. https://doi.org/10.1016/j.spmi.2021.107068
8. Surender P., Vipin K. Dirac fermions in zigzag graphene nanoribbon in a finite potential well. Physica B: Condensed Matter. 2021. V.614. P.412916. https://doi.org/10.1016/j.physb.2021.412916
9. Sitnitsky A.E. Exactly solvable double-well potential in Schrödinger equation for inversion mode of phosphine molecule. Computational and Theoretical Chemistry. 2021. V.1200. P.113220. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2021.113220
10. Costa B.G., Gomez I.S. Information-theoretic measures for a position-dependent mass system in an infinite potential well. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2020. V.541. P.123698. https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.123698
11. Leonel E.D., Kuwana C.M., Yoshida M., Oliveira J.A. Chaotic diffusion for particles moving in a time dependent potential well. Physics Letters A. 2020. V. 384. №28. P.126737. https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126737
12. Юрасов Н.И., Мартинсон Л.К. Движение микрочастицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с подвижной стенкой. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки». 2015. №6 (63). С. 40–45. https://doi.org/10.18698/1812-3368-2015-6-40-45

Для цитирования:

Карцев А.И., Сафронов А.А., Махов М.И. Модель поведения квантовой частицы в потенциальной яме с подвижной стенкой. // Журнал радиоэлектроники. – 2024. – №. 3. https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.3.1