

МЕХАНИКА

УДК 532.5

DOI 10.17223/19988621/41/5

А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков,
В.А. Потеряева, Э.Е. Либин

**ВОЛНОВАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ СЛОЯ
КОМПАКТИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ**

Применительно к движению молекул гелия через слой компактированных алмазных наночастиц рассмотрена одномерная задача волновой динамики. Предложена вычислительная технология для интегрирования уравнения Шредингера, основанная на выделении двух фундаментальных численных решений задачи о прохождении волн через барьер. Линейная комбинация этих решений определяет искомую волновую функцию, а ее сшивка с асимптотическими граничными условиями позволяет определить коэффициенты прохождения и отражения частиц от барьера, в роли которого выступает энергия компактированных наночастиц.

Ключевые слова: поле потенциальных сил, наночастицы, движение молекул, численные методы, проницаемость, уравнение Шредингера.

Классические гамильтоновы системы, используемые в молекулярной динамике в качестве математической модели, не позволяют решать задачи о накоплении частиц даже в случае изучения проницаемости сверхтонких нанопористых слоев, где, несмотря на их малые размеры, все равно речь идет о нахождении миллионов молекул в представительных объемах, примыкающих к наноразмерному слою. Если воспользоваться дебройлевским представлением частицы и шредингеровской волновой динамикой, то плотность молекул в окрестности и внутри слоя будет находиться автоматически в процессе решения задачи. Последнее обстоятельство обусловлено тем, что плотность вероятности нахождения частиц есть квадрат модуля волновой функции.

В работе Глазера [1] показано, что уравнение Шредингера получается из положений классической механики посредством применения формализма Гамильтона – Якоби. Опираясь на классическое квантово-механическое описание в настоящей работе мы попытались оценить величину проницаемости сверхтонкого нанопористого слоя, полученную с учетом накопления молекул в окрестности мембраны, составленной сферическими алмазными наночастицами.

Для исследования задачи прохождения частиц с массой m и энергией E через разные потенциальные барьеры, т. е. через слой вещества определённой толщины, заполненного источниками энергии, можно решить одномерное стационарное уравнение Шредингера.

Классическое уравнение Шредингера имеет вид [2–4]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (1)$$

Здесь ψ – волновая функция, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка, U – потенциальная энергия, i – мнимая единица.

Зная функцию ψ из решения уравнения (1), можно найти плотность распределения частиц:

$$\rho = |\psi|^2. \quad (2)$$

Если потенциальная энергия U не зависит от времени, то решение (1) ищется в виде

$$\psi = \Psi \exp(-iEt/\hbar). \quad (3)$$

Тогда для функции Ψ имеем стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(z))\Psi = 0. \quad (4)$$

Применим уравнение Шредингера к задаче о прохождении частицами нанопористого слоя. Вместо постоянной Планка возьмем величину, пропорциональную размеру слоя $\hbar = l\sqrt{m\varepsilon}$, где l – поперечный размер слоя; ε – глубина потенциальной ямы в парном взаимодействии молекул структуры слоя и фильтруемой компоненты; m – масса частицы, проходящей через слой. Таким образом, уравнение (4) можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + (K^2 - \tilde{U}(z))\Psi = 0, \quad (5)$$

где $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, $\tilde{U}(z) = \frac{2m}{\hbar^2}U(z)$.

На удалении от барьера, как слева, так и справа, $\tilde{U}(z) = 0$, поэтому в этих зонах уравнение (5) редуцируется к виду

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + K^2\Psi = 0. \quad (6)$$

Частными решениями уравнения (6) являются функции e^{iKz} и e^{-iKz} , причем первая частная функция представляет падающую на барьер волну, а вторая – отраженную. Их комбинация должна обеспечивать необходимый физический результат, поэтому в качестве математических граничных условий для функции $\Psi(z)$ можно записать

$$\Psi(z) = e^{iKz} + be^{-iKz}, \Psi(z) = ae^{iKz}. \quad (7)$$

Эти условия можно назвать асимптотическими. Они должны выполняться на удалении от барьера, таком, что влиянием самого барьера уже можно было пренебречь. Здесь же мы воспользовались локальным характером влияния барьера как источника возмущений на волновую картину в его окрестности.

Первая функция в (7) определяет значение плотности вероятности нахождения частицы слева от барьера, а вторая – справа. Коэффициенты a и b имеют смысл коэффициентов прохождения и отражения в направлении оси z . Для их нахождения представим волновую функцию $\Psi(z)$ как суперпозицию двух независимых решений $\Psi_1(z)$ и $\Psi_2(z)$ с начальными условиями

$$\Psi_1(0) = 0, \left. \frac{\partial \Psi_1(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 1; \quad \Psi_2(0) = 1, \left. \frac{\partial \Psi_2(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0; \quad (8)$$

$$\Psi(z) = C_1 \Psi_1(z) + C_2 \Psi_2(z), \quad \Psi'(z) = C_1 \Psi_1'(z) + C_2 \Psi_2'(z). \quad (9)$$

Функции $\Psi_1(z)$ и $\Psi_2(z)$ находятся в результате последовательного интегрирования уравнения (4) с двумя группами начальных условий (8) по технологии Рунге-Кутты высокого порядка точности. После решения двух задач Коши приравниваем значения функции $\Psi(z)$ и её производной $\Psi'(z)$, полученные численным интегрированием с асимптотическими значениями (7). В результате получим систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \text{при } z = 0 \quad & 1 + b = C_2, \\ & iK - biK = C_1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{при } z = z_n \quad & ae^{iKz_n} = C_1 \Psi_1(z_n) + C_2 \Psi_2(z_n), \\ & aike^{iKz_n} = C_1 \Psi_1'(z_n) + C_2 \Psi_2'(z_n). \end{aligned}$$

Разрешая систему, найдем неизвестные коэффициенты C_1 , C_2 , a и b . В общем случае все найденные величины оказываются комплексными.

Можно убедиться, что решение уравнения (4) имеет колебательный характер с переменной амплитудой, и коэффициент прохождения D молекул определяется как отношение амплитуд колебаний функции $|\Psi|^2(z)$ после барьера и до него. На рис. 1 представлен график плотности распределения частиц гелия для барьера U/k порядка 390 К. Здесь k – постоянная Больцмана.

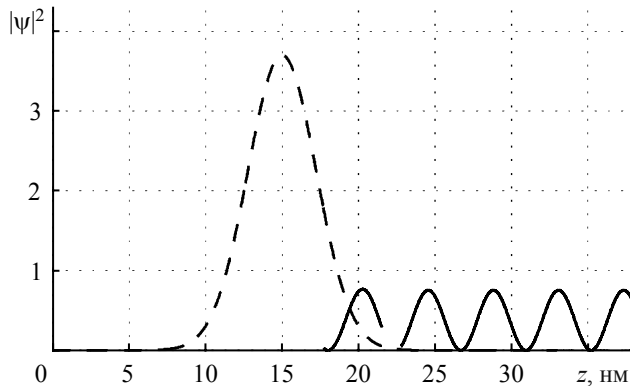


Рис. 1. Плотность распределения частиц до и после барьера
Fig. 1. Density of particle distribution before and after the barrier

На рис. 2 представлена зависимость проницаемости слоя от величины энергии частицы гелия E/k при фиксированной высоте барьера $U/k = 400$ К. Для исследования был выбран сглаженный барьер шириной около 10 нм. Как видно из рис. 2, для рассмотренного барьера полученное решение близко к аналитическому.

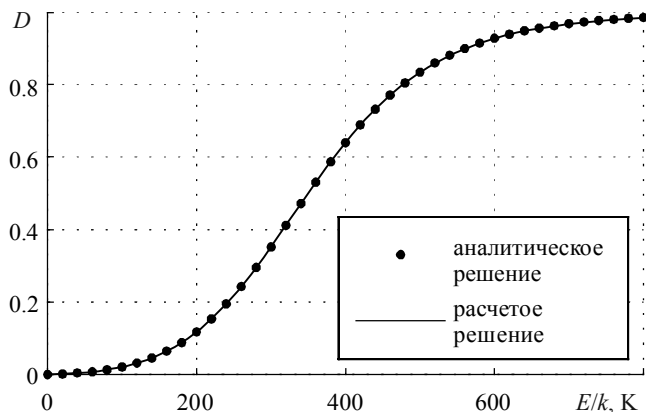


Рис. 2. Сравнение аналитического [5] и расчетного решений для сглаженного барьера

Fig. 2. Comparison of analytical [5] and designed solutions for the smoothed barrier

Определим величину барьера $U(z)$ в случае, когда слой составлен сферическими наночастицами одинакового размера. В рассмотренном ниже примере частицы алмазные и имеют диаметр $d = 1$ нм. Потенциал воздействия от отдельной сферической однородной наночастицы на молекулу имеет вид [6]

$$U(r) = 2\pi q \int_0^\pi \sin \theta \int_0^R r'^2 \Pi_1(\sqrt{r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \theta}) dr' d\theta, \quad (10)$$

где q – количество молекул в единице объема вещества, R – радиус частицы,

$$\Pi_1(\rho) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{\rho} \right) \text{th} \left(\left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^5 \right) - \text{модифицированный потенциал парных моле-}$$

кулярных взаимодействий, построенный на основе классического LJ-потенциала. Здесь σ и ε – параметры этого потенциала, которые определяются как средние величины от соответствующих параметров мономолекулярных взаимодействий:

$$\sigma = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}, \quad \varepsilon = (\varepsilon_{11} \cdot \varepsilon_{22})^{1/2}. \quad (11)$$

Причем $\sigma_{11}, \varepsilon_{11}$ определяют углерод-углеродные взаимодействия; $\sigma_{22}, \varepsilon_{22}$ – взаимодействия атомов гелия между собой.

Пусть слой представляет собой некоторую совокупность N частиц, центры которых лежат в одной плоскости. Движение молекул будем рассматривать в плоскости центров частиц (y, z) , причем ось z направлена перпендикулярно слою (рис. 3).

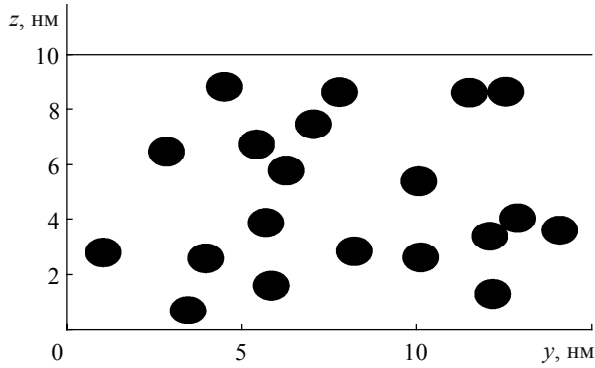


Рис. 3. Слой компактированных алмазных наночастиц
Fig. 3. The layer of compacted diamond nanoparticles

Тогда для атомов гелия, перемещающихся в плоскости (y, z) , энергия воздействия от всей совокупности частиц будет равна простой сумме потенциалов (10):

$$U(y, z) = \sum_{j=1}^N U(r_j), \quad (12)$$

где $r_j = \sqrt{(y - y_j)^2 + (z - z_j)^2}$ – расстояние от центра j -й наночастицы до рассматриваемой точки. Осредняя (12) по ширине слоя, найдем

$$U(z) = \frac{1}{L} \int U(y, z) dy, \quad (13)$$

где L – некоторый представительный участок слоя в направлении оси Oy .

Потенциальный барьер слоя наночастиц с энергией поля (13) имеет сложную форму, представленную на рис. 4. На рис. 5 показана зависимость проницаемости слоя от его пористости.

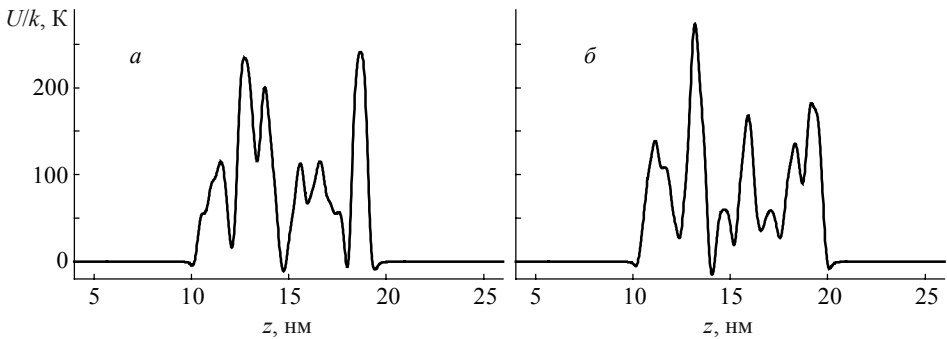


Рис. 4. Разные потенциальные барьеры слоя наночастиц, определенные различным характером расположения частиц в слое, $U_1(z)$ – распределение потенциала в исходном варианте расположения частиц (а), $U_2(z)$ – частицы смещены относительно своего исходного положения, $\sigma = 0.8953$ (б)

Fig. 4. Different potential nanoparticle layer barriers characterised by various arrangements of particles in the layer, (a) $U_1(z)$ is the potential distribution in the original version of the particle arrangement, (b) $U_2(z)$, the particles are shifted from the initial position, $\sigma = 0.8953$

Попадая в каждую из энергетических ям (портрет слоя – рис. 4), изучаемая частица переходит в связанные состояния. Здесь она имеет возможность участвовать в колебательных движениях с определенными частотами, присущими конкретной энергетической впадине. Поскольку частица, в роли которой выступает атом гелия, сама является волной, имеющей определенную частоту, в рассматриваемой динамической системе возможны резонансные явления. Однако выполненное осреднение по ширине слоя сгладило энергетическую неоднородность мембраны, исходный вид которой полностью определяет характер резонансных явлений. Более строгое изучение вклада этого эффекта на способность гелия преодолевать барьер в рамках плоской постановки задачи может быть проведено для случая проницаемости параллельного пучка нанонитей. Расчетами была выявлена зависимость проницаемости слоя от формы барьера при одинаковой загруженности слоя частицами (рис. 5).

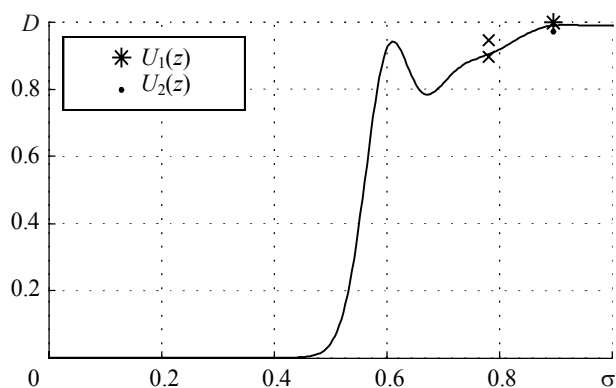


Рис. 5. Зависимость проницаемости слоя от пористости

Fig. 5. Layer permeability as a function of porosity

Составляющие слой алмазные частицы являются слишком плотными, поэтому энергия от углеродных атомов этих частиц, размазанная по объему слоя, все равно является очень большой. В связи с этим, как видно из рис. 5, проницаемость порядка 50 % достигается лишь при высокой пористости слоя порядка 55 %.

ЛИТЕРАТУРА

1. Глазер В. Основы электронной оптики: пер. с нем. М.: Гостехиздат, 1957. 764 с.
2. Мотт Н., Снеддон И. Волновая механика и её применения. М.: Наука, 1966. 428 с.
3. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика: учеб. пособие. М.: Изд-во МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2004. 496 с.
4. Морс Ф.М., Фейнбах Г. Методы теоретической физики: в двух томах. Т. 2. М.: Книга по Требованию, 2012. 942 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика. Т. 3. 4-е изд. М.: Наука, 1989. 766 с.
6. Бубенчиков А.М., Бубенчиков М.А., Потекаев А.И., Либин Э.Е., Худобина Ю.П. Потенциальное поле углеродных тел как основа сорбционных свойств барьерных газовых систем // Изв. вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 7. С. 10–15.

Статья поступила 11.03.2016 г.

Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Poteryaeva V.A., Libin E.E. (2016) THE WAVE PERMEABILITY OF A COMPACTED NANOPARTICLE LAYER. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 3(41). pp. 51–57

DOI 10.17223/19988621/41/5

The simplest example of the porous filtering system is a compacted material obtained by pressing spherical nanoparticles. Filtration characteristics of this material depend on mobility of molecules in the field of van der Waals forces.

A one-dimensional wave dynamic problem of the helium molecules motion through the ultrathin porous layer of compacted diamond nanoparticles is considered. These layers of matter make a potential barrier obstructing the passage of molecules. The permeability of the layer is derived by solving the Schrödinger equation.

The calculation technology for integration of the Schrödinger equation is suggested. It is based on two fundamental numerical solutions of the problem of waves passing through the barrier of potential forces. A linear combination of these solutions determinates the wave function. The square of this function is a probability of detecting molecules in a particular place. Linking this representation of wave function with asymptotic boundary conditions makes it possible to determine the coefficients of passing and reflecting of molecules from the barrier. The barrier is the energy of compacted nanoparticles.

This technology provides with results close to the analytical solution in particular cases. This fact allows to generalize the method to the case of molecular movement through the layer of nanoparticles and to determine the dependence between permeability and porosity of the layer.

Keywords: potential force field, nanoparticles, molecular motion, numerical method, permeability, Schrödinger equation.

BUBENCHIKOV Aleksey Mikhaylovich (Doctor of Physics and Mathematics, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: alexy121@mail.ru

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, GazpromTransgaz Tomsk, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: michael121@mail.ru

POTERYAEVA Valentina Aleksandrovna (National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: valentina.poteryaeva@gmail.com

LIBIN Eduard Ephimovich (Candidate of Physics and Mathematics, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)

REFERENCES

1. Von Dr. Walter Glaser (1952) *Grundlagen der Elektronenoptik*. Wien: Springer-Verl. (In German).
2. Mott I.N., Sneddon N.F. (1963) *Wave Mechanics and Its Applications*. Dover: Notations edition.
3. Martinson L.K., Smirnov E.V. (2004) *Kvantovaya fizika* [Quantum physics]. Moscow: MGTU Publ.
4. Morse F.M., Feshbach G. (1953) *Methods of Theoretical Physics. Vol. 2*. New York: McGraw-Hill.
5. Landau L.D., Lifshitz E.M. (1989) *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Vol. 3*.
6. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Libin E.E., Khudobina Yu.P. (2015) The Potential Field of Carbon Bodies as a Basis for Sorption Properties of Barrier Gas Systems. *Izv. vuzov. Fizika. – Russian Physics Journal*. 58(7). pp. 882–888. DOI 10.1007/s11182-015-0586-6.