

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ХРАНЕНИЕ ЧАСТИЦ В НАНОСЛОЯХ.

М.И.Гаврилов, С.И.Попов

Рассмотрен точечный спектр двухчастичной задачи в нанослоях с возмущениями- локальными искажениями границы и отверстием связи между двумя слоями. Использовано приближение Хартри. Расчеты проведены методом конечных элементов.

Вступление.

Известно, что искривленные квантовые слои способны удерживать частицы. Это связано с тем, что соответствующий гамильтониан имеет непустой дискретный спектр. При этом увеличение кривизны ведет к увеличению мощности множества точек дискретного спектра. Вопрос о количестве частиц, которые могут быть удержаны в искривлении волновода (слоя) или его границы важен для многих физических приложений, в частности, для увеличения количества водорода, хранящегося в межслоевом пространстве. Гамильтониан плоского бесконечного слоя не имеет связанных состояний. В работе предложена и исследована модель двухчастичной системы в искривленном квантовом слое и изучена связь между геометрией искривления слоев, интенсивностью взаимодействия частиц и возможностью удерживать несколько частиц в области искажения границ слоев. Многочастичная квантовая задача рассмотрена методом Хартри. Собственные функции и собственные значения многочастичного гамильтониана находятся методом конечных элементов. Найдена область на плоскости параметров системы («величина искажения границы – интенсивность взаимодействия частиц»), соответствующая возможности удержания частиц. Результаты могут быть использованы при создании соответствующих наноструктур. Разработанный метод может применяться при анализе спектра других многочастичных систем.

1. Математическая модель искривленного волновода.

Чтобы оценить количество нейтральных частиц (фермионов), которые могут находиться в связанном состоянии в окрестности искривленной части слоя, достаточно найти размерность подпространства дискретного спектра для одночастичного гамильтониана и воспользоваться принципом Паули. Если слой переходит в себя при сдвиге вдоль одной из осей, то задача сводится к двумерной (задача об искривленной полосе). Рассмотрим именно этот случай. Пусть Σ - полоса в \mathbb{R}^2 постоянной ширины $d = 2a$. (рис.1) Пусть Γ ось Σ . С точностью до евклидова преобразования полоса однозначно задается полушириной a и кривизной $s \rightarrow \gamma(s)$, заданной на Γ , где s - длина кривой. Будем предполагать, что выполнены следующие условия регулярности а) Σ несамопересекающаяся; б) $a \|\gamma\|_\infty < 1$, в) γ финитна и $\gamma \in C^2$, γ', γ'' - ограничены.

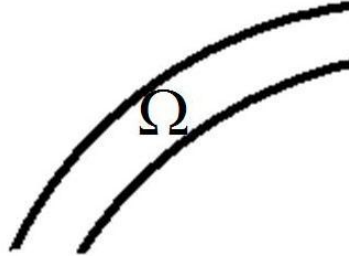


Рис. 1

Пусть $\hbar = 2m = 1$. Используя естественные ортогональные координаты (s, u) в Σ , сводим одночастичный гамильтониан к оператору

$$H = -\partial_s (1 + u\gamma)^{-2} \partial_s - \partial_u^2 + V(s, u)$$

на $L^2(\square \times (-a, a))$ с потенциалом

$$V(s, u) = -\frac{\gamma(s)^2}{4(1 + u\gamma(s))^2} + \frac{u\gamma''(s)}{2(1 + u\gamma(s))^3} - \frac{5u\gamma''(s)^2}{4(1 + u\gamma(s))^4},$$

который определен и существенно самосопряжен на

$$D(H) = \{f : f \in C^\infty, f(s, \pm a) = 0, Hf \in L^2\}.$$

Представляя оператор в виде разложения по модам, сводим задачу к одномерной. [2-4]. Здесь используем оценки Бирмана-Швингера. Мажорируем потенциал V :

$$W = \frac{\gamma(s)^2}{4\delta_-^2} + \frac{a|\gamma''(s)|}{2\delta_-^3} + \frac{5a^2\gamma''(s)^2}{4\delta_-^4}, \quad \delta_\pm = 1 \pm a\|\gamma\|_\infty.$$

Пусть для $j = 2, 3, \dots$

$$W_j(s) = \begin{cases} 0, & \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 (j^2 - 1) > \|W\|_\infty, \\ W(s), & \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 (j^2 - 1) \leq \|W\|_\infty. \end{cases}$$

Тогда количество N нейтральных частиц с полуцелыми спинами S , которые могут быть удержаны в связанном состоянии в окрестности искривления слоя оценивается [1] следующим образом:

$$N \leq (2S + 1) \left(1 + \delta_+^2 \frac{\int_{\square} W(s) |s - t| W(t) ds dt}{\int_{\square} W(s) ds} + \sum_{j=2}^{\infty} \delta_+^2 \int_{\square} W(s) ds \right)$$

Здесь границы слоя предполагались непроницаемыми (граничное условие Дирихле). В рамках такого же подхода можно анализировать и другие условия. В частности, полупрозрачную границу можно рассматривать как дельта-потенциал, сосредоточенный на кривой (см., например, [5]).

В случае заряженных частиц (протонов) необходимо учитывать их взаимодействие друг с другом (отталкивание). При этом возможна ситуация, когда дискретный спектр оказывается пуст. А именно, N -частичный гамильтониан данной системы имеет пустой дискретный спектр, если

$$T_\beta(N) + \frac{e^2 N(N-1)}{2\beta\sqrt{7}} \geq \|W\|_\infty N + \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 N + \frac{e^2}{18\beta\sqrt{2}}$$

для некоторого $\beta \geq \max\{2b, 596e^{-2}\}$, где $2b$ - диаметр носителя функции γ , e - заряд частицы,

$$T_\beta(N) = \begin{cases} 2\sum_{m=1}^n \lambda_m, & N = 2n, \\ 2\sum_{m=1}^n \lambda_m + \lambda_n, & N = 2n+1, \end{cases}$$

λ_m - упорядоченные собственные значения лапласиана Дирихле для области $\left[-\frac{3}{2}\beta\delta_+, \frac{3}{2}\beta\delta_+\right] \times [-a, a]$.

2. Одночастичная задача для искривленного волновода.

Задачу о двух взаимодействующих частицах в двумерном волноводе с искажением границы будем решать методом Хартри. Соответствующая одночастичная задача рассмотрена в [6] в рамках вариационного подхода. Рассматриваемая область задается следующим образом:

$$\Omega = \{(x, y) \in R^2 : 0 < y < a(1 + \lambda f(x))\}, \quad \text{supp } f = [-b, b], \quad f \in C_0^\infty(R).$$

Пробная функция, которую можно считать приближением собственной функции, ищется в виде

$$\psi = \begin{cases} (1 + \lambda \eta f(x)) \chi_1(y), & |x| \leq b, \\ e^{-\eta|x \mp b|} \chi_1(y), & \pm x > b. \end{cases}$$

Здесь

$$z = \frac{\pi^2 \|f\|^2}{a^2 \|f'\|^2},$$

η выбираем из условия

$$\eta^2 - 2\eta z + 3z + K^2 < 0, \quad K = \sqrt{\sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{2n}{n^2 - 1}\right)} = \sqrt{\frac{\pi^2}{3} + \frac{1}{4}},$$

Которое может быть выполнено, если $z^2 - 3z - K^2 > 0$, в частности, при выполнении этого условия можно взять $\eta = z$, что соответствует минимуму параболы.

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n y}{a}.$$

$$h = \frac{1}{2} \lambda^2 d_1 \|f\|^2, \quad d_1 = \frac{\pi^2}{a^2 z} (z^2 - 3z - K^2).$$

Оценка расстояния связанного состояния от границы непрерывного спектра дается неравенствами

$$-\lambda^4 d_0^2 \|f\|^4 + O(\lambda^5) \leq E - \frac{\pi^2}{a^2} \leq -\frac{1}{4} \lambda^4 d_1^2 \|f\|^4 + O(\lambda^5),$$

$$d_0 = \left(\frac{4\pi b}{a^2} \right)^2 - 3 \frac{\pi^2}{a^2}.$$

Далее рассмотрим волновод длины $2k$, ширины $2a$ с синусообразной деформацией

$$f(x) = d \sin \left(\frac{(x-b)\pi}{2b} \right), \quad |x| \leq b.$$

высоты d и ширины $2b$:

(рис. 2). На краях волновода

заданы условия Неймана, на остальных границах условия Дирихле:

$$-\Delta \psi = E\psi, \quad \psi|_{\partial\Omega} = 0. \quad (3.1)$$

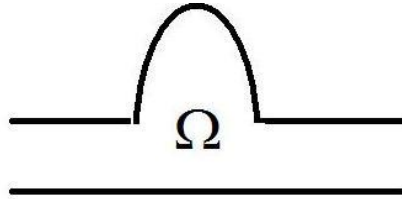


Рис. 2

Для нахождения связанных состояний системы методом конечных элементов, необходимо преобразовать задачу к вариационной постановке. Для этого умножим исходное уравнение (3.1) на функцию ψ и проинтегрируем по области Ω :

$$a(\psi, \phi) = \int_{\Omega} (\Delta \psi \phi + E\psi \phi) d\Omega =$$

$$= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + E\psi \phi \right) d\Omega. \quad (3.2)$$

Теперь вместо решения задачи в частных производных, будем рассматривать задачу минимизации функционала (3.2). Указанный минимум и дает искомое значение.

Для численного решения использовался программный пакет FreeFem++ с библиотекой ARPACK для нахождения собственных значений матрицы. Область Ω разбивается на треугольные подобласти с заданными на них квадратичными функциями (рис. 3).

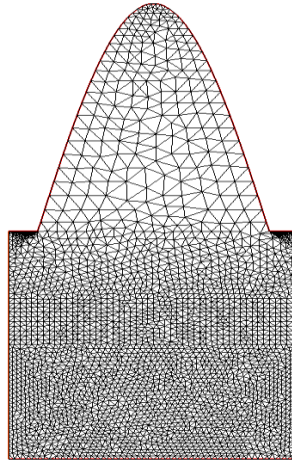


Рис. 3

Была написана соответствующая программа для вычисления собственных состояний. Зависимость энергии от высоты деформации показано на рис. А1.

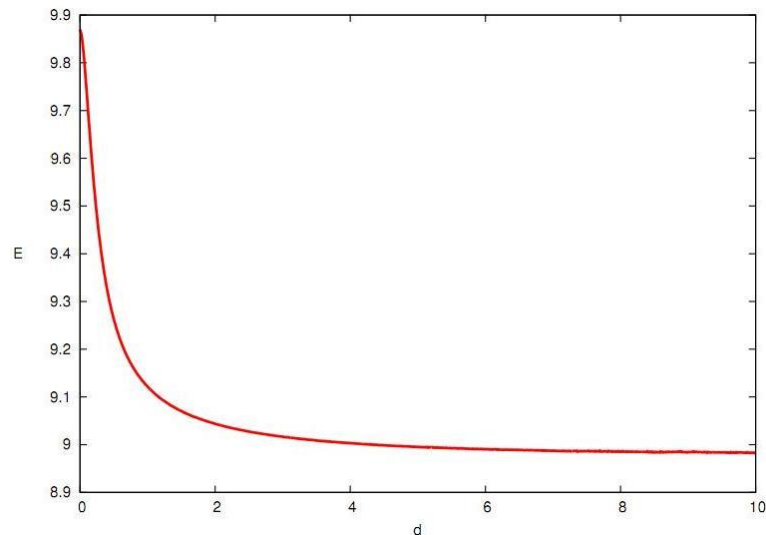


Рис. А1. Зависимость собственного состояния E от величины искажения границы волновода d .

3. Двухчастичная задача в волноводе с искажением границы.

Рассмотрим задачу о двух взаимодействующих частицах в двумерном волноводе с искажением границы:

$$\begin{cases} -\Delta_1 \Psi - \Delta_2 \Psi + V(r_1, r_2) \Psi = \lambda \Psi \\ \Psi|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

уравнение Шредингера двух взаимодействующих частиц.

Обычно такие уравнения решаются переходом к новым координатам (центру масс), но в нашем случае после перехода переменные не разделяются из-за наличия краевых условий.

Поэтому решение уравнения будем искать методом Хартри. Для этого искомую волновую функцию представим в виде:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2),$$

где ψ_1 и ψ_2 - одночастичные функции, а r_1 и r_2 - радиус-векторы соответствующих частиц.

Тогда исходная задача сводится к системе уравнений относительно функций ψ_1 и ψ_2 :

$$\begin{cases} -\Delta\psi_1(r_1) + U_2(r_2)\psi_1(r_1) = E_1\psi_1(r_1) \\ -\Delta\psi_2(r_2) + U_1(r_1)\psi_2(r_2) = E_2\psi_2(r_2) \end{cases}, \quad (4.2)$$

где

$$U_n(r_n) = \int_{\Omega} |\psi_n(r_n)|^2 u(r_1, r_2) dr_{3-n},$$

а $u(r_1, r_2)$ - потенциал межчастичного взаимодействия. Например, для кулоновского

$$u(r_1, r_2) = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}.$$

отталкивания он будет иметь вид

Тогда система уравнений будет выглядеть так:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_1(r_1) + U_1(r_1)\psi_1(r_1) = E_1\psi_1(r_1) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_2(r_2) + U_2(r_2)\psi_2(r_2) = E_2\psi_2(r_2) \end{cases}$$

$$U_1(r_1) = \int_{\Omega} |\psi_2(r_2)|^2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} dV_2, U_2(r_2) = \int_{\Omega} |\psi_1(r_1)|^2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} dV_1.$$

При δ -взаимодействии система уравнений (4.2) примет вид:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_1(r_1) + U_0 |\psi_2(r_1)|^2 \psi_1(r_1) = E_1\psi_1(r_1) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_2(r_2) + U_0 |\psi_1(r_2)|^2 \psi_2(r_2) = E_2\psi_2(r_2) \end{cases}$$

$$U_1(r_1) = \int_{\Omega} U_0 |\psi_2(r_2)|^2 \delta(r_1 - r_2) dV_2, U_2(r_2) = \int_{\Omega} U_0 |\psi_1(r_1)|^2 \delta(r_1 - r_2) dV_1.$$

Алгоритм решения таков:

- Для начала приведем нашу систему к вариационной форме (вместо краевой задачи для уравнения Шредингера будем решать задачу об экстремуме интегрального функционала) для использования метода конечных элементов.

- В результате система уравнений (4.2) будет иметь вид:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (\nabla\psi_1 \cdot \nabla\phi_1 + U_0 |\psi_2|^2 \psi_1 \phi_1) dr_1 - E_1 \int_{\Omega} \psi_1 \phi_1 dr_1 = 0, \\ \int_{\Omega} (\nabla\psi_2 \cdot \nabla\phi_2 + U_0 |\psi_1|^2 \psi_2 \phi_2) dr_2 - E_2 \int_{\Omega} \psi_2 \phi_2 dr_2 = 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

- В качестве начального приближения для собственной функции берем решение одночастичной задачи без потенциала.
- Найденное решение подставляем в (4.3) и повторяем процедуру.
- Алгоритм заканчивается, когда с заданной точностью будут повторяться значения для энергии.
- Связанные состояния соответствуют значению энергии ниже границы непрерывного спектра(π^2).

При фиксированной геометрии волновода сходимость данного алгоритма ухудшается с ростом энергии межчастичного взаимодействия U_0 . В силу монотонности этого поведения, методом дихотомии возможно численно найти значение U_0 , обеспечивающее гарантированное наличие связанного состояния. Варьируя величину деформации, можно получить зависимость соответствующей нижней оценки для энергии взаимодействия (рис. A2).

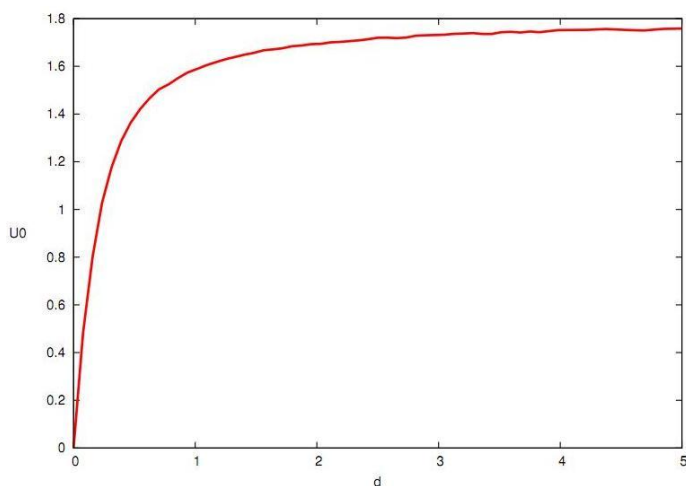


Рис. A2. Нижняя оценка границы области существования связанных состояний U_0 в зависимости от величины искажения границы волновода d

Была написана соответствующая программа для вычисления собственных состояний в двухчастичной задаче для искривленного волновода.

Также в приложении А приведены примеры различных параметров волновода, при которых частицы ведут себя по-разному:

1. Рис. A3. U_0 (потенциал межчастичного взаимодействия)=1, d (высота искривления волновода)=1. Частицы «накладываются» друг на друга.
2. Рис. A4. $U_0=100$, $d=1$. Частицы разлетаются в разные стороны.
3. Рис. A5. $U_0=700$, $d=1$. Одна частица застревает в бугорке, вторая улетает на бесконечность.
4. Рис. A6. $U_0=-1$, $d=1$. Частицы «накладываются» друг на друга.

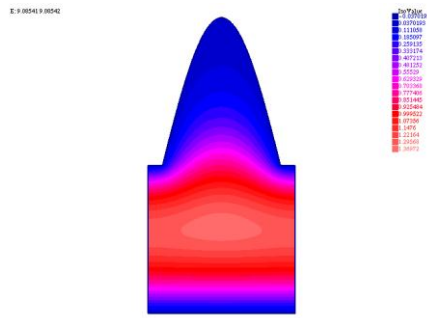


Рис. А3

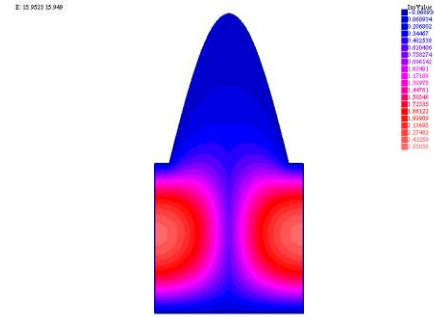


Рис. А4

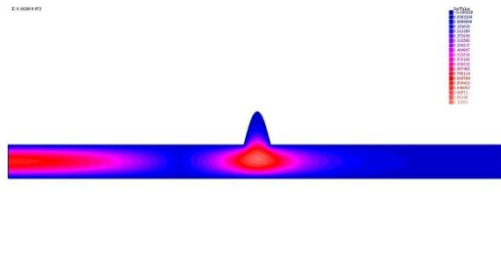


Рис. А5

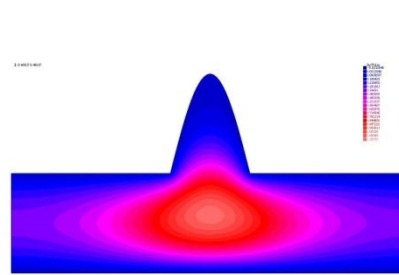


Рис. А6

4. Расчет связанных состояний в системе связанных волноводов.

Для исследования возможности построения квантовых операций при «волноводной» интерпретации очень важно знание коэффициентов прохождения и отражения в системе при различных значениях ее параметров. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

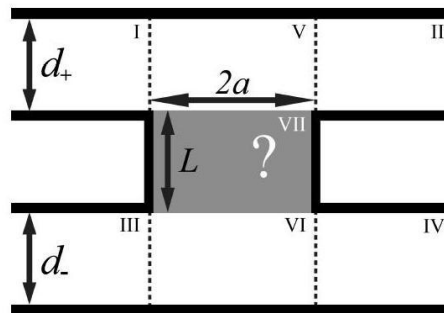


Рис. 4

Рассмотрим систему двух волноводов, связанных через отверстия, с условиями Дирихле на границе (рис. 4):

$$-\Delta\psi = E\psi, \psi|_{\partial\Omega} = 0. \quad (5.1)$$

При этом допускается, что в области связи могут быть введены некоторые дополнительные условия, зависящие только от вертикальной координаты, например, потенциал, электрическое поле, и др. Пусть ширины верхнего и нижнего волноводов равны d_+ и d_- соответственно, $b = 2a$ – ширина окна, возможно также существование L – высоты области связи (если область связи отсутствует, то $L = 0$). Положим также полную энергию пролетающей частицы равной k^2 . Будем рассматривать решения, не имеющие особенностей в угловых точках областей.

Для нахождения связанных состояний системы методом конечных элементов, необходимо преобразовать задачу к вариационной постановке. Для этого умножим исходное уравнение (5.1) на функцию ϕ и проинтегрируем по области Ω :

$$a(\psi, \phi) = \int_{\Omega} (\Delta \psi \phi + E \psi \phi) d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + E \psi \phi \right) d\Omega \quad (5.2)$$

Теперь вместо решения задачи в частных производных, будем рассматривать задачу минимизации функционала (5.2). Указанный минимум и дает искомое значение.

Для численного решения использовался программный пакет FreeFem++ с библиотекой ARPACK для нахождения собственных значений матрицы. Область Ω разбивается на треугольные подобласти с заданными на них квадратичными функциями (рис. 5).

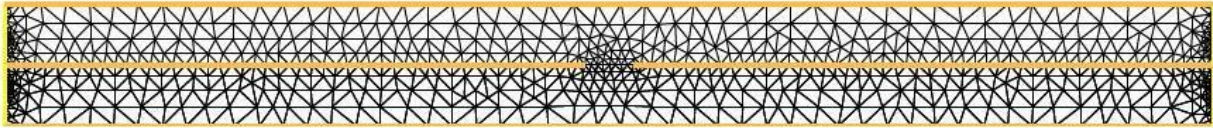


Рис. 5

Для численного поиска переписем уравнение (5.2) в виде:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} - \sigma \psi \phi \right) d\Omega = \lambda \int_{\Omega} \psi \phi d\Omega \quad (5.3)$$

где σ – сдвиг, определяющий область поиска собственных значений.

Обозначим левую часть выражения (5.3) как OP , а правую – B . На краях волноводов зададим условие Неймана, так как они лучше отвечают отсутствию границ в задаче. Для задания условий Дирихле в дискретизированной задаче, в соответствующих элементах матрицы OP установим очень большие значения (1030). Заметим, что так как решается уравнение вида $w = OP^{-1}Bv$, к матрице B их добавлять не надо, в противном случае будут получаться только ложные маленькие собственные значения (порядка 10–30), соответствующие $E = 0$. Для хранения матрицы OP используется «контурная» структура данных (skyline matrix), при которой для каждой строки хранится только список элементов от первого ненулевого столбца до последнего. Матрица B более разрежена, поэтому для ее описания достаточно представления {индекс \rightarrow значение}. Для получения обратной матрицы OP^{-1} используется LUP-разложение.

Следует отметить, что метод конечных элементов в задаче на собственное значение работает эффективнее, чем, например, аналитический метод разложения по полной системе функций, когда решение ищется в виде ряда по некоторой полной системе функций, рассматриваемая краевая задача сводится к бесконечной системе уравнений для коэффициентов этих разложений, которая обрезается до конечного числа членов и решается. Этот метод сталкивается с большими вычислительными трудностями. На рис. 6 показано сравнение результатов, полученных методом конечных элементов, с результатами, полученными асимптотическими методами.

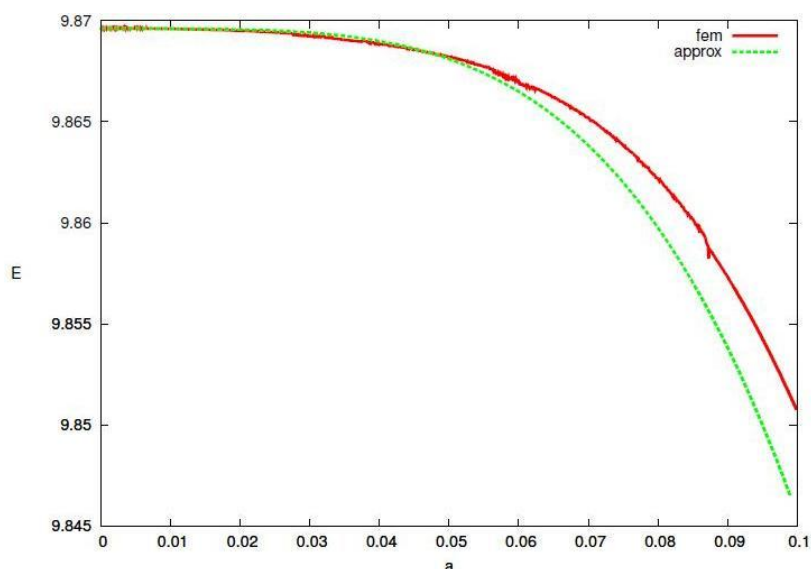


Рис 6. Зависимость первого собственного значения от ширины окна $2a$ по результатам численного моделирования (fem) и аппроксимации (approx).

Заметим, что метод конечных элементов также позволяет находить связанные состояния не только для маленьких отверстий, но и для сравнимых с размерами системы (рис. 7).

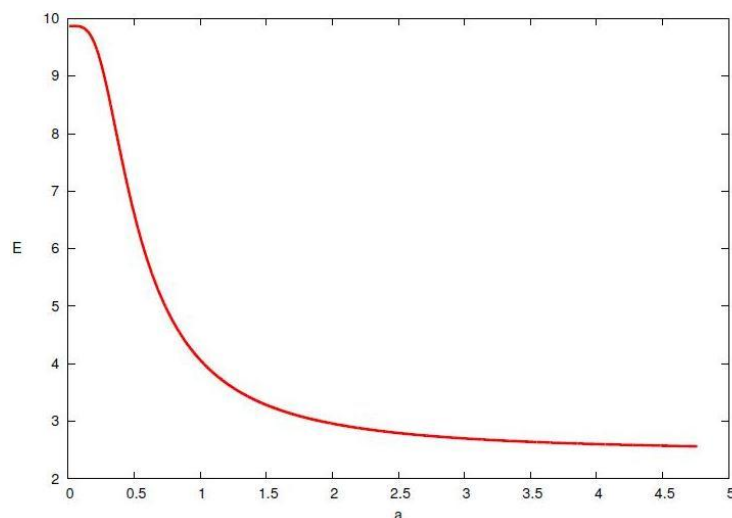


Рис. 7. Зависимость первого собственного значения от ширины окна $2a$ по результатам численного моделирования.

Благодарности

Работа поддержана программами "Развитие научного потенциала российской высшей школы" (проект 2.1.1/4215), "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" (контракты Р689 НК-526Р, and 14.740.11.0879), грантом 11-08-00267 РФФИ.

Литература

[1] Exner P., Vugalter S.A. On the number of particles that a curved quantum waveguide can bind. J. Math. Phys. 1999. V. 40 (10). P. 4630-4638.

- [2] Seto N. Bargmann's inequalities in spaces of arbitrary dimension. Publ. RIMS.1974. V. 9. P. 429-461.
- [3] Klaus M. On the bound state of Schrodinger operators in one dimension. Ann. Phys (Leipzig). 1977. V. 108. P. 288-300.
- [4] Newton R.G. Bounds for the number of bound states for Schrodinger equation in one and two dimensions. J. Operator Theory. 1983. V. 10. P. 119-125.
- [5] Лобанов И.С., Лоторейчик В.Ю., Попов И.Ю. Оценка снизу спектра двумерного оператора Шредингера с δ – потенциалом на кривой. ТМФ. 2010. Т. 162 (3). С. 397-407.
- [6] Exner P., Vugalter S.A. Bound states in a locally deformed waveguide: critical case. Lett. Math. Phys. 1997. V. 39. P. 59-68.