

## 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 наноустройств. 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  $\Sigma$  - полоса в  $\mathbb{R}^2$  постоянной ширины  $d = 2a$ . (рис.1) Пусть  $\Gamma$  ось  $\Sigma$ . С точностью до евклидова преобразования полоса однозначно задается полушириной  $a$  и кривизной  $s \rightarrow \gamma(s)$ , заданной на  $\Gamma$ , где  $s$  - длина кривой. Будем предполагать, что выполнены следующие условия регулярности а)  $\Sigma$  несамопересекающаяся; б)  $a \|\gamma\|_\infty < 1$ , в)  $\gamma$  финитна и  $\gamma \in C^2$ ,  $\gamma', \gamma''$  - ограничены.

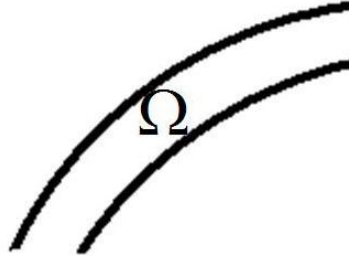


Рис. 1

Пусть  $\hbar = 2m = 1$ . Используя естественные ортогональные координаты  $(s, u)$  в  $\Sigma$ , 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  $\gamma$ ,  $e$  - заряд частицы,

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

$\lambda_m$  - 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

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

$\eta$  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:

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

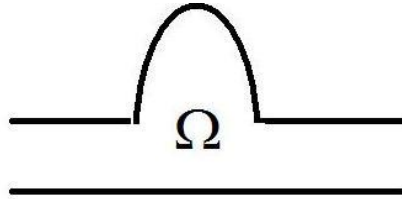


Рис. 2

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

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

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

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  $\Omega$  разбивается на треугольные подобласти с заданными на них квадратичными функциями (рис. 3).

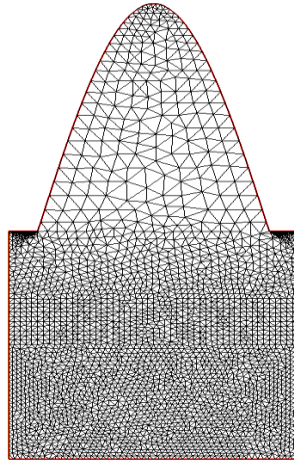


Рис. 3

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

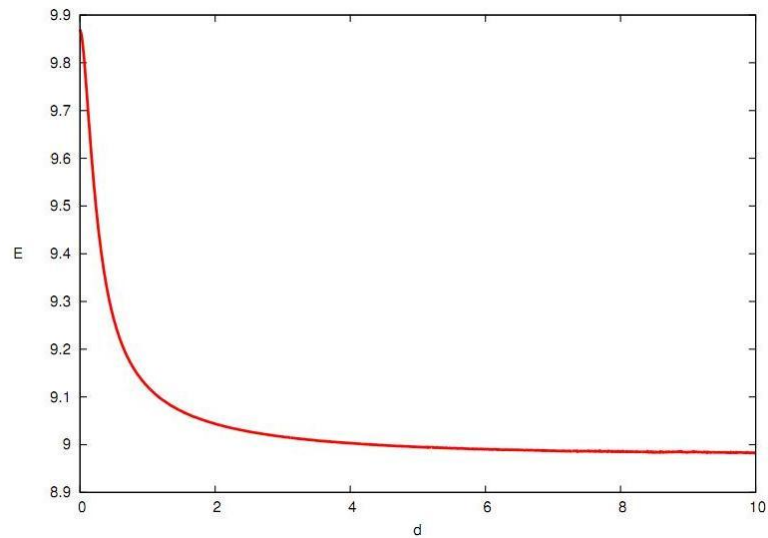


Рис. А1. Зависимость собственного состояния  $E$  от величины искажения границы волновода  $d$ .

### 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  $\psi_1$  и  $\psi_2$  - одночастичные функции, а  $r_1$  и  $r_2$  - радиус-векторы соответствующих частиц.

Тогда исходная задача сводится к системе уравнений относительно функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$ :

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

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  $\delta$ -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( $\pi^2$ ).

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).

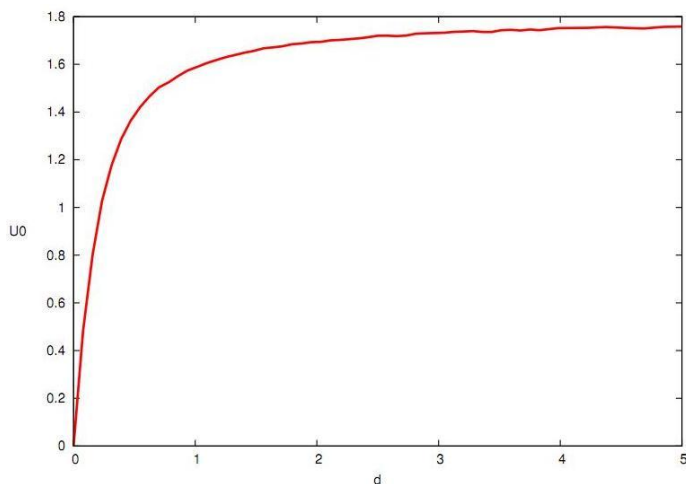


Рис. A2. Нижняя оценка границы области существования связанных состояний  $U_0$  в зависимости от величины искажения границы волновода  $d$

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.

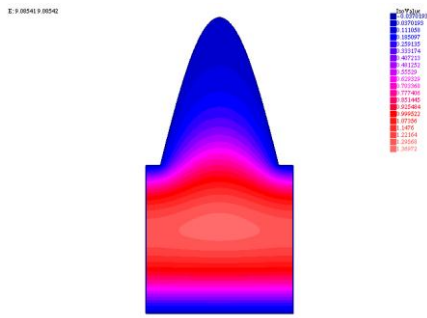


Рис. А3

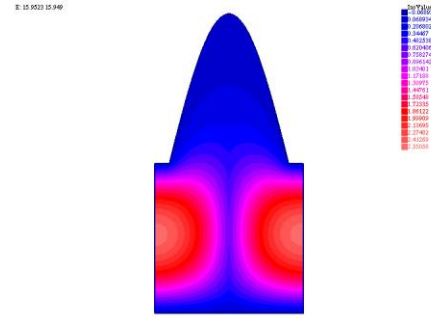


Рис. А4

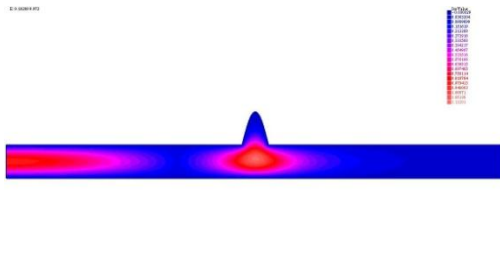


Рис. А5

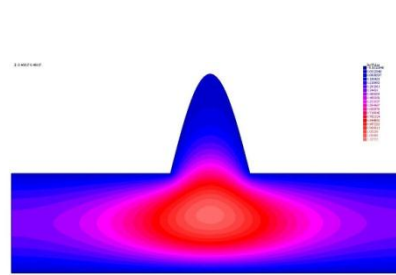


Рис. А6

#### 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.

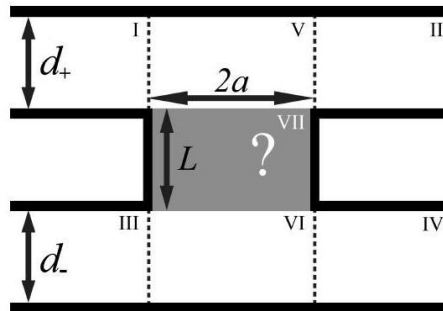


Рис. 4

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  $\phi$  и проинтегрируем по области  $\Omega$ :

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

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  $\Omega$  разбивается на треугольные подобласти с заданными на них квадратичными функциями (рис. 5).

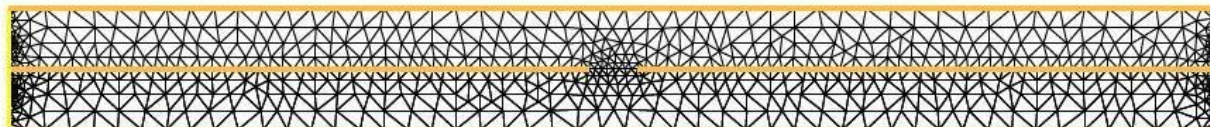


Рис. 5

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  $\sigma$  – 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.

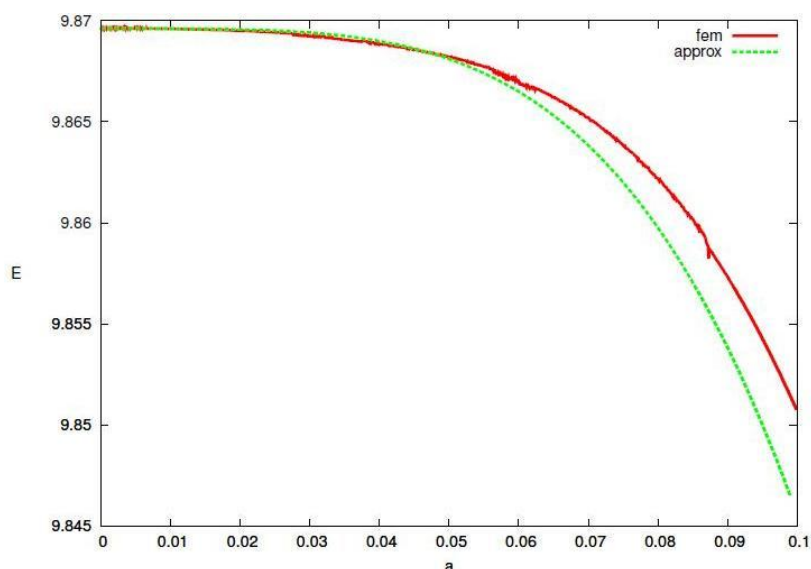


Рис 6. Зависимость первого собственного значения от ширины окна  $2a$  по результатам численного моделирования (fem) и аппроксимации (approx).

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

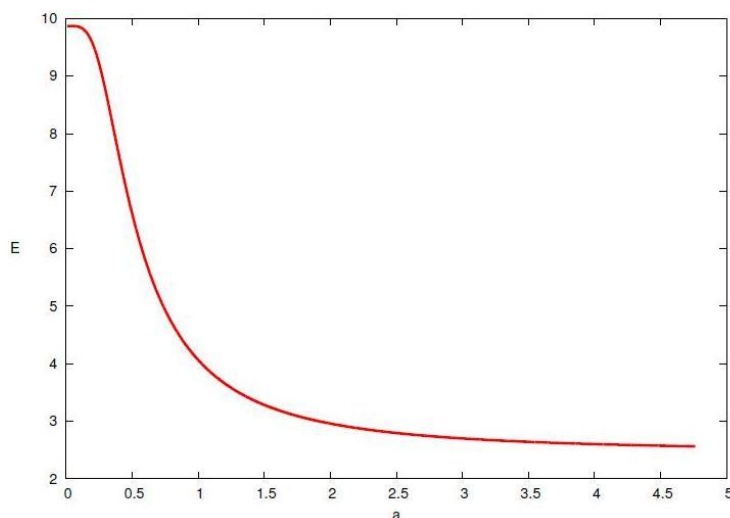


Рис. 7. Зависимость первого собственного значения от ширины окна  $2a$  по результатам численного моделирования.

### 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  $\delta$  – 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.