

На правах рукописи

БРЫЗГАЛОВ АЛЕКСАНДР АНАТОЛЬЕВИЧ

Метод расщепления по физическим факторам
в нестационарной задаче туннелирования электронов в
квантовых кольцах

Специальность: 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Обнинск 2012

Работа выполнена в Обнинском институте атомной энергетики - филиале Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования - Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» на кафедре Общей и специальной физики.

Научный руководитель:

кандидат физико-математических
наук, доцент
Карманов Фёдор Иванович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор
Комаров Вячеслав Викторович

доктор физико-математических наук,
Мележик Владимир Степанович

Ведущая организация:

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сургутский государственный университет Ханты-Мансийского автономного округа - Югры»

Защита состоится «18» апреля 2012 г. в ____ часов 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.130.09 при Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ», г. Москва, Каширское шоссе, 31.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Автореферат разослан « » марта 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор

Леонов А. С

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена разработке и обоснованию экономических численных методов решения нестационарного уравнения Шредингера. В работе рассматриваются вопросы построения численно-аналитических алгоритмов на основе принципа расщепления по физическим факторам, предлагается реализация этих алгоритмов в современных системах компьютерной математики, проводится сравнение точности и эффективности расчета при сопоставимых вычислительных ресурсах с существующими методами, применяемыми для решения уравнения Шредингера, приводятся примеры расчета характеристик модельных систем.

Актуальность темы диссертации. В современных условиях практически во всех областях знаний применяется математическое моделирование. Математические модели, которые детально описывают исследуемые реальные процессы, обычно достаточно сложны. Основные проблемы и сложность задач математической физики обусловлена их нелинейностью, многомерностью и наличием нескольких одновременно протекающих процессов, часто требующих разных временных масштабов для их анализа.

Получить точные аналитические решения таких задач удастся лишь в некоторых исключительных случаях. В большинстве подобных ситуаций применяются приближенные, например, конечно-разностные методы. Для их эффективного использования конечно-разностные методы должны обладать основополагающими свойствами аппроксимации, устойчивости, сходимости и экономичности.

Эффективным средством приближенного решения многомерных задач математической физики являются методы расщепления. В их основе лежит процедура расщепления исходной многомерной задачи на несколько взаимосвязанных упрощенных задач, существенно облегчающих программирование, допускающих возможности распараллеливания и структурирования вычислений. Важный вклад в развитие методов расщепления начиная с 50-х годов прошлого века был сделан в работах А.А. Самарского, Н.Н. Яненко, Г.И. Марчука, С.К. Годунова, В.И. Агошкова, О.М. Белоцерковского, Ж.-Л. Лионса, Р. Рихтмайера, К. Мортон и др.

Для методов расщепления одним из основных положений является понятие суммарной аппроксимации многомерного уравнения системой одномерных уравнений, позволяющее производить расщепление не только по пространственным переменным, но и по отдельным физическим факторам, отражающим специфику задачи и выделяющим качественные особенности протекающих процессов.

Особенно интересной является ситуация, в которой расщепленные модельные задачи удастся решить аналитически, хотя бы частично, а для оставшейся части получить численное решение. Как показывает опыт, получаемые при этом комбинированные численно-аналитические методы являются более эффективными и экономичными в сравнении с традиционными конечно-разностными схемами.

Примером такой ситуации является процедура решения нестационарного уравнения Шредингера. Подобный подход в задаче о движении свободного электрона в поле электромагнитной волны в сочетании с методом Галеркина для решения получившейся стационарной задачи предлагается, например, в работах Е.А. Волковой, А.М.Попова и А.Т. Рахимова.

В условиях нанотехнологической революции, охватившей в настоящее время многие отрасли науки и техники, огромное внимание уделяется исследованию физических и химических свойств низкоразмерных квантовых систем, глобул и кластеров. Эксперименты показывают зависимость физических свойств наноразмерных и мезоскопических объектов от размеров наночастиц и кластеров, но универсальная зависимость пока не установлена. Перспективы манипуляции с отдельными атомами и их группами при создании и получении новых конструкционных материалов, полупроводниковых приборов, устройств для записи и передачи информации открывают новые возможности и горизонты технологического прогресса. В этих условиях становится особенно актуальной возможность математического моделирования мезоскопических объектов с целью исследования их структуры, предсказания поведения в различных условиях, прогнозирования и оценки перспектив получения материалов с заранее заданными свойствами. Огромное количество научной литературы, посвященной математическому моделированию нанообъектов, указывает на актуальность изучения таких систем.

В диссертации рассматриваются низкоразмерные квантовые системы, такие как квантовые точки, кольца и проволоки, находящиеся в магнитном поле. Такого рода системы интересны как с фундаментальной точки зрения, как объекты, на которых можно проверить особенности макроскопических квантовых эффектов, например, эффект Ааронова-Бома и возможности существования незатухающих токов. Экспериментальные работы последних лет говорят о значительном прогрессе в создании подобных систем. В настоящее время удастся получать как отдельные квантовые объекты, так и целые организованные конгломераты низкоразмерных систем. Тем не менее, неослабевающий интерес с точки зрения исследования квантовых явлений представляют именно отдельные «базовые» объекты, такие как квантовые точки и квантовые кольца.

Возможности практического использования такого рода систем связаны, например, с современными тенденциями микроминиатюризации элементной базы и созданием оптоэлектронных приборов, в которых передача сигнала осуществляется прохождением небольшой группы заряженных частиц или даже отдельных электронов. Как известно, процесс проникновения частиц сквозь соответствующие барьеры в нанокластерах – это процесс туннелирования, и исследование закономерностей такого процесса представляет безусловный интерес для разработки и проектирования оптоэлектронных приборов. Одной из модельных систем, рассматриваемых в данной работе, является система концентрических квантовых колец, помещенных во внешнее постоянное или переменное магнитное поле.

Моделирование передачи сигнала в подобных системах невозможно без временного описания процессов туннелирования, что означает необходимость рассмотрения нестационарной задачи. В связи с этим, актуальными становятся исследования временной динамики волновых функций электронов в квантовых точках и квантовых кольцах. Созданию алгоритмов, позволяющих производить расчеты временной динамики с высоким уровнем точности, посвящена данная диссертация.

Предлагаемый подход основан на использовании потенциалов специфического типа, которые воспроизводят такие модельные низкоразмерные системы как квантовые точки и квантовые кольца, а также некоторые другие. Класс подобных потенциалов определяет стационарные задачи, относящиеся к точно-решаемым моделям. Используя этот факт, в некоторых случаях представляется возможным распространить предлагаемый подход на потенциалы с ограниченной областью определения, а также более сложные потенциалы, образованные комбинациями простых потенциалов квантовых колец и точек, с сохранением эффективности используемого метода.

«Двумные» потенциалы как модельные широко используются в различных областях физики, химии, биологии и других наук, например, для расчета характеристик туннелирования и определения скоростей химических реакций, свойств радиоактивного распада. Наиболее изученными являются случаи, когда потенциалы как функции координат состоят из конечных или бесконечных наборов кусочно-постоянных функций или δ -функций Дирака. Аналитическое решение такой стационарной задачи на собственные значения для уровней энергии и волновых функций хорошо известно. Для решения стационарной задачи в остальных случаях (даже, когда потенциал составлен из двух парабол) вычислять собственные значения приходится, используя численные методы. Предлагаемое семейство схем расщепления для метода расщепления по физическим факторам в комбинации с разложением по базисным функциям стационарной задачи, несомненно, может быть использовано для моделирования временной динамики систем на основе «двумных» потенциалов.

Проведение расчетов в квантовомеханических задачах в современных условиях часто проводится с использованием комплексов программ на основе существующих пакетов символьной математики, таких как MathCAD или Mathematica. Несмотря на широкие возможности современных пакетов, для решения физически интересных задач туннелирования электронов в наноструктурах использования какого-то одного пакета недостаточно: требуется создание комбинированной системы или написание отдельного комплекса (кода) программ, ориентированного на задачи с указанной спецификой.

Цель работы и задачи исследования:

- Построение решения нестационарного уравнения Шредингера численно-аналитическим методом расщепления по физическим факторам для

моделирования временной динамики волновых функций электронов квантовых колец.

- Модификация численно-аналитических методов на основе метода расщепления по физическим факторам для задач моделирования временной динамики волновых функций электронов квантовых колец, в том числе для случаев с конечной областью определения.
- Реализация алгоритма для получения наборов базисных функций для использования в методе расщепления по физическим факторам на конечном носителе.
- Разработка программного комплекса для расчетов временной динамики волновых функций электронов низкоразмерных квантовых систем.
- Демонстрация возможностей метода расщепления по физическим факторам на примере моделирования процессов туннелирования электронов в системе двух concentric квантовых колец.

Основные результаты, выносимые на защиту:

- Модель управления туннелированием электронов между кольцами в системе двух concentric квантовых колец с помощью магнитного поля.
- Семейство численно-аналитических схем для решения нестационарного уравнения Шредингера на основе метода расщепления по физическим факторам для задачи о туннелировании электронов в concentric квантовых кольцах.
- Реализация алгоритма построения набора базисных функций с помощью вариационного метода для вычислений методом расщепления по физическим факторам в области конечного размера.
- Алгоритм и комплекс программ для расчетов временной динамики волновых функций электронов квантовых колец в переменном магнитном поле с использованием компьютерных систем символьной математики.

Практическая ценность результатов работы

- Разработанный подход на основе метода расщепления по физическим факторам является эффективным средством решения нестационарного уравнения Шредингера для модельных потенциалов квантовых точек и квантовых колец.
- Изучение временной динамики волновых функций электронов позволяет планировать и интерпретировать результаты экспериментов для низкоразмерных квантовых систем, находящихся в переменном магнитном поле.

Научная новизна работы

- Предлагаемый набор численно-аналитических схем для метода расщепления по физическим факторам обладает более высокой эффективностью для рассматриваемого класса задач при сопоставимых вычислительных ресурсах по сравнению с традиционными конечно-

разностными методами, используемыми для решения уравнения Шредингера.

- Получены наборы собственных функций и собственных значений для задачи туннелирования электронов в системе двух концентрических квантовых колец, описываемой «двумяными» потенциалами.
- Впервые предложена модель управления туннелированием электронов в системе двух концентрических колец с помощью переменного магнитного поля.

Достоверность результатов обеспечивается:

- использованием фундаментальных физических законов, описывающих динамику поведения частиц в микромире;
- сопоставлением с известными результатами других авторов и соответствием известным частным решениям и промежуточным результатам;
- тестированием предлагаемого в работе метода на ряде модельных задач;
- аккуратным учетом точности воспроизведения значений имеющих место интегралов движения в процессе моделирования временной динамики волновой функции.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на 7 российских и международных конференциях:

- 1) Региональная Студенческая Конференция «Математическое Моделирование», 18 – 19 мая 2006 г., г. Обнинск.
- 2) Международная конференция «Математическая физика и её приложения», 8 –13 сентября 2008 г., г. Самара.
- 3) 2-я Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов «Информационные системы и технологии 2009», 15 мая 2009 г., г. Обнинск.
- 4) 2-я Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях», 27-29 мая 2009 г., г. Москва.
- 5) 7-я Национальная конференция «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии», 16-21 ноября 2009 г., г. Москва.
- 6) Вторая международная конференция «Математическая физика и её приложения», 29 августа - 4 сентября 2010 г., г. Самара.
- 7) V Международная конференция «Математические идеи П. Л. Чебышёва и их приложение к современным проблемам естествознания», 14-18 мая 2011 г., г. Обнинск.

Личный вклад соискателя. Все результаты работы, выносимые на защиту, получены лично соискателем или при его непосредственном участии, а именно:

- реализованы расчеты временной динамики волновых функций электронов двумерных и трехмерных квантовых колец в переменном магнитном поле в программных комплексах Mathcad и Mathematica;
- разработан и реализован алгоритм построения базисов в системе Mathematica;
- рассчитаны собственные волновые функции и уровни энергии для систем, описываемых «двумными» потенциалами, в магнитных полях с различными значениями напряженности с помощью системы Mathematica;
- на основе проведенных расчетов продемонстрирована возможность управления туннелированием электронов в системе двух концентрических квантовых колец с помощью магнитного поля.

Список научных публикаций. Основные результаты диссертации опубликованы в 12 публикациях (включая 5 статей из списка ВАК) и докладах на российских и международных конференциях.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа изложена на 158 страницах машинописного текста и состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 117 наименований и 4 приложений.

Содержание работы

Во введении рассматриваются низкоразмерные квантовые системы как основные объекты исследований в области нанотехнологий, обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются задачи исследования, связанные с нестационарной динамикой волновых пакетов и туннелированием электронов в процессе передачи сигналов в устройствах оптоэлектроники.

Первая глава посвящена обзору литературы. Рассматриваются как общие вопросы туннелирования, так и конкретные результаты расчетов характеристик туннелирования через низкоразмерные квантовые системы, моделируемых кусочно-постоянными потенциалами. Особое внимание уделяется квантовым кольцам и квантовым точкам.

Кроме вопросов туннелирования и описания моделей, воспроизводящих низкоразмерные квантовые системы, в этой главе описываются возможности вариационного метода для получения волновых функций электронов, двигающихся в потенциалах с компактным носителем, а также приводятся сведения о возможностях управления характеристиками процессов туннелирования в системах квантовых колец, использующих «двумные» потенциалы.

Во второй главе рассматриваются методы решения смешанной начально-краевой задачи для нестационарного уравнения Шредингера вида (приводится уравнение с учетом выбора безразмерных величин и перехода к

цилиндрической системе координат, а также разделения радиальных и угловых переменных $\Psi(r, \theta, t) = \psi(r, t) \exp(im\theta) / \sqrt{2\pi r}$:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{4r^2} + \tilde{V}(r) \right) \psi(r, t) + \left(\frac{m}{r} - \frac{r}{2an^2(t)} \right)^2 \psi(r, t); \\ \psi(R_1, t) = \psi(R_2, t) = 0; \\ \psi(r, 0) = A_0 \cdot \exp\left(-\frac{(r - R_0)^2}{2\sigma^2}\right); \end{cases} \quad (1)$$

описывающего поведение невзаимодействующих электронов, находящихся в однородном переменном магнитном поле в области с потенциалом вида:

$$V(r) = a_1 / r^2 + a_2 r^2 - V_0. \quad (2)$$

Здесь применяются следующие обозначения: m – квантовое число углового момента, $an(t) = \sqrt{\hbar / (eH(t))}$ – магнитная длина, e – заряд электрона, $H(t)$ – медленно меняющееся магнитное поле; A_0 , R_0 , R_1 , R_2 , σ , a_1 , a_2 , V_0 – некоторые параметры; $\hbar$ – постоянная Планка, c – скорость света, i – мнимая единица.

$$\begin{aligned} \tilde{V}(r) = a_1 / r^2 / \left(\hbar^2 / (2\mu) \right) + a_2 r^2 / \left(\hbar^2 / (2\mu) \right) - V_0 / \left(\hbar^2 / (2\mu) \right) = \\ \tilde{a}_1 / r^2 + \tilde{a}_2 r^2 - \tilde{V}_0, \end{aligned} \quad (3)$$

где μ – эффективная масса электрона ($0,067 \mu_e$ – массы электрона).

Потенциалы вида $V(r)$ (a_1 , a_2 , V_0 – положительные константы) применяются для описания низкоразмерных квантовых структур различного типа:

- квантовое кольцо;
- квантовая точка;
- квантовая антиточка и др.

Для решения поставленной задачи предлагается несколько вариантов схем расщепления, отличающихся выбором базиса для решения стационарной задачи. Возможные варианты выбора базиса:

- (а) базис из собственных функций стационарной задачи без учета магнитного поля;
- (б) набор собственных функций с учетом постоянного магнитного поля;
- (в) варьируемый базис, состоящий из предварительно подготовленных собственных функций с учетом переменного магнитного поля.

В случае (а) метод сводится к тому, что эволюция решения на временном слое Δt представляется как суперпозиция движения волнового пакета в эффективном потенциале и локального взаимодействия волны-частицы с переменным магнитным полем. В результате такого расщепления вместо одного уравнения получаются две упрощённые задачи:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi^R}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{(\tilde{a}_1 - 0.25 + m^2)}{r^2} + \tilde{a}_2 r^2 - \tilde{V}_0 \right) \psi^R; \\ \psi^R(t_{k-1}) = \psi^H(t_{k-1}); \\ \psi^R(R_1) = \psi^R(R_2) = 0; \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi^H}{\partial t} = \left(-\frac{m}{an^2(t)} + \frac{r^2}{4 \cdot an^4(t)} \right) \psi^H; \\ \psi^H(t_{k-1}) = \psi^R(t_k); \end{cases} \quad (5)$$

где $k = 1; 2; 3; \dots$. На первом шаге, считаем, что:

$$\psi^H(t_0) = A_0 \cdot \exp\left(-\frac{(r - R_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (6)$$

В практических задачах, как правило, граничные условия задаются на внутреннем и внешнем радиусе квантового кольца (R_1 и R_2). Однако в рамках данной модели принимаются значения $R_1 = 0$, а $R_2 \sim \infty$, что позволяет сохранить возможность получения аналитического решения стационарной задачи на собственные значения и соответствует случаю изолированного квантового кольца.

Решение в окончательном виде представляется в виде разложения по базису собственных функций задачи (4) - в нулевом магнитном поле, умноженному на решение задачи (5):

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, t_k) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{n,m} \left(\frac{z}{2}\right)^{(M(m)+1)/2} \exp\left(-\frac{z}{4}\right) {}_1F_1\left(-n, M(m)+1; \frac{z}{2}\right) \times \\ \times \exp(im\theta) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{n,m} \Delta t\right) \times \exp\left(-i \int_{t_{k-1}}^{t_k} -\frac{m}{an^2(t)} + \frac{r^2}{4an^4(t)} dt\right), \end{aligned} \quad (7)$$

где $z = r^2 / \lambda^2$, $\Delta t = t_k - t_{k-1}$, $M(m) = \sqrt{m^2 + \tilde{a}_1}$, $\lambda = \sqrt{\hbar c / (\mu \omega_0)}$. Из условия ограниченности волновых функций следует требование обращения гипергеометрической функции в полином, откуда получается следующая зависимость для уровней энергии:

$$\tilde{E}_{n,m} = (n + 1/2 + M(m)/2) \hbar \omega_0 - \tilde{V}_0; \quad n = 0; 1; 2; \dots, \quad (8)$$

где $\omega_0 = \sqrt{8\tilde{a}_2 / \mu}$.

Базисные функции для вариантов схемы (б) или (в) получаются решением стационарной задачи $H\psi = E\psi$, где гамильтониан H выбирается согласно задаче (1). Каждому значению напряженности магнитного поля соответствует набор собственных функций вида:

$$\psi(r, \theta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{n,m} \left(\frac{z}{2} \right)^{(M(m)+1)/2} \exp\left(-\frac{z}{4}\right) {}_1F_1\left(-n, M(m)+1; \frac{z}{2}\right) \times \\ \times \exp(im\theta) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{n,m} \Delta t\right), \quad (9)$$

где $z = r^2 / \lambda^2$, $\Delta t = t_k - t_{k-1}$, $M(m) = \sqrt{m^2 + \tilde{a}_1}$, $\lambda = \sqrt{\hbar c / (\mu \omega)}$. Как и ранее, из условия ограниченности волновых функций следует требование обращения гипергеометрической функции в полином, откуда получается следующая зависимость для уровней энергии:

$$\tilde{E}_{n,m} = (n + 1/2 + M(m)/2) \hbar \omega - m \cdot \hbar \omega_c / 2 - \tilde{V}_0; \quad n = 0; 1; 2; \dots, \quad (10)$$

где $\omega_0 = \sqrt{8\tilde{a}_2 / \mu}$, $\omega_c = eH(t) / \mu$, $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$.

Тестовые расчеты в рамках метода расщепления по физическим факторам для базиса (а) и (б) дают хорошо согласующиеся результаты с аналитическим решением, получаемым прямым разделением переменных $\psi(r, t) = R(r)T(t)$ в отсутствии магнитного поля или в постоянном магнитном поле.

В случае переменного магнитного поля разделение переменных из-за наличия слагаемого, содержащего произведение $(rH(t))$, не удастся провести. В этой ситуации вариант схемы расщепления (в) показывает наилучшие результаты.

Отметим, что в расчетных примерах, показанных в данной работе, суммирование по квантовому числу n производится по первым (не менее) 15 слагаемым; и анализируется поведение гармоник с фиксированным угловым моментом m .

Для дополнительного контроля получаемых результатов исходная задача (1) решалась численно. В первом варианте предлагалась конечно-разностная симметричная схема со вторым порядком аппроксимации по пространству и по времени. Решение системы конечно-разностных уравнений выполнялось с помощью метода прогонки. Выбранная симметричная схема обеспечивает унитарность выбранной аппроксимации эволюционного оператора с точностью до второго порядка по временному шагу в постоянном магнитном поле. Во втором варианте использовалась конечно-разностная схема с 5 порядком точности по пространству и вторым порядком точности по времени, основанная на использовании метода Нумерова в сочетании методом стрельбы.

Получаемые результаты с помощью использования схем расщепления (а), (б), (в), аналитического решения (для случаев нулевого и сильного магнитного поля) и численных методов согласуются между собой.

Предлагаемые схемы расщепления используют аналитическое решение на выбранном временном слое Δt , что обеспечивает уровень точности более высокий, чем при использовании стандартных численных схем (см. таблицу 1). Кроме высокой точности расчетов и умеренности использования вычислительных ресурсов, метод расщепления по физическим факторам дает возможность применения выверенных алгоритмов из пакетов символьной математики, позволяет перейти к более широкому классу аналитически

интерпретируемых физически интересных задач, расширить возможности графического представления промежуточных и конечных результатов и сократить затраты времени на программирование, что в конечном счете, позволит повысить производительность труда.

Таблица 1. Оценки времени расчёта и используемой памяти при применении различных методов решения рассматриваемой задачи.

способ решения	время расчёта			размер массива данных		
	$H=0$	$H=1$ Тл	$H=H(t)$	$H=0$	$H=1$ Тл	$H=H(t)$
симметричная схема	4 с	8 с	17 (10) с	1120x200 т.	1400x400 т.	1120x200 т.
метод Нумерова	62 с	74 с	91 (10) с	1120x2000 т.	1400x2000 т.	700x3000 т.
метод расщепления по физ. факторам	20 (10) с	20 (15) с	20 (30) с	350x100 т.	350x100 т.	350x100 т.

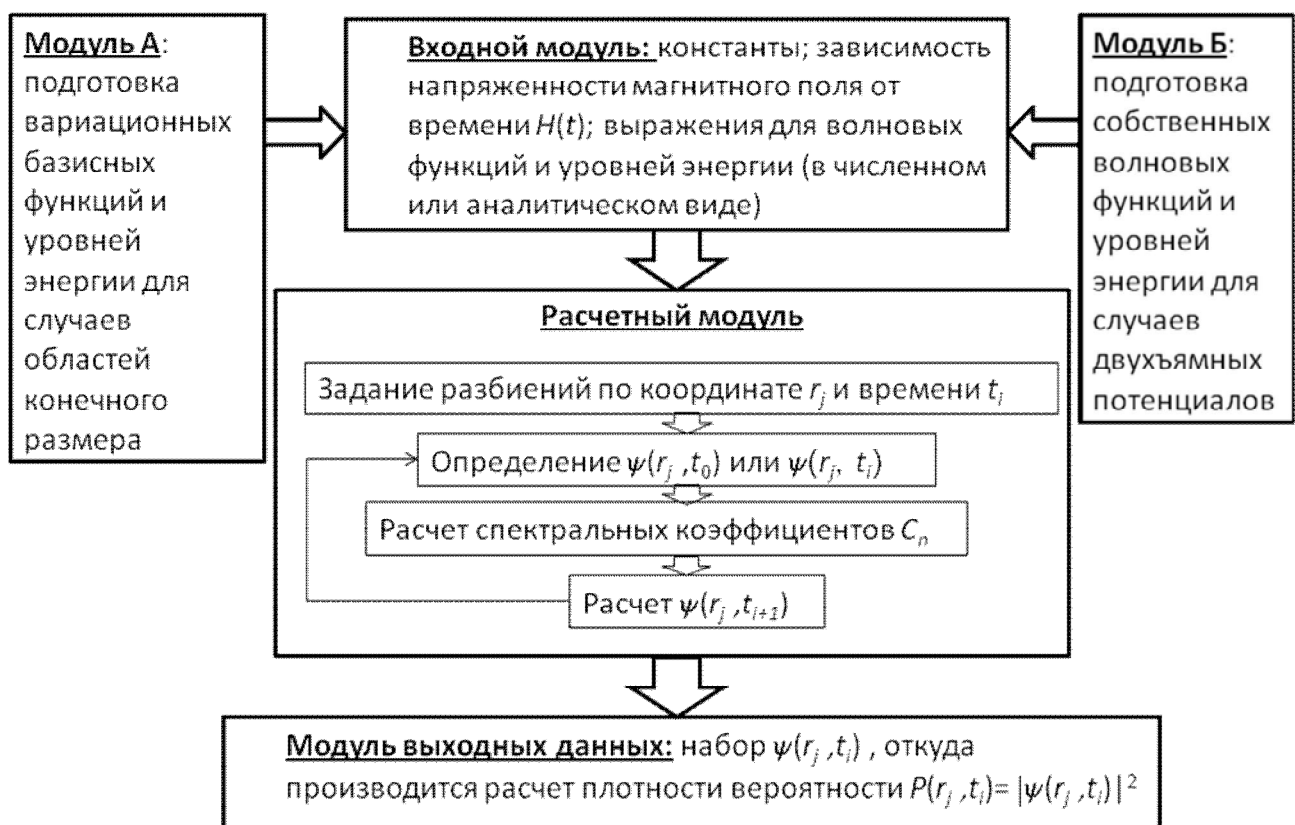


Рис. 1. – Программный комплекс TiDyCal, предназначенный для расчетов временной динамики волновых функций.

Численно-аналитический метод расщепления по физическим факторам реализуется в программном комплексе TiDyCal (Time Dynamics Calculator). Общая структура комплекса представлена на рисунке 1. В качестве входных данных используются выражения для собственных волновых функций и уровней энергии, полученные как аналитическими, так и численными методами. Также задается зависимость напряженности магнитного поля от времени. После произведенных расчетов в качестве выходных данных выводится набор волновых функций на координатной сетке и последовательных временных шагах. Модули подготовки входных данных А и

Б были разработаны для случаев потенциалов с ограниченной областью определения и «двумных» потенциалов, соответственно.

Разработанный подход применяется в расчетах со слабым, сильным и переменным (во времени) магнитным полем (рис. 2), что позволяет детально проанализировать взаимное влияние потенциала и магнитного поля на характеристики волновой функции и оценить достоинства, недостатки и погрешности применения метода в разных условиях.

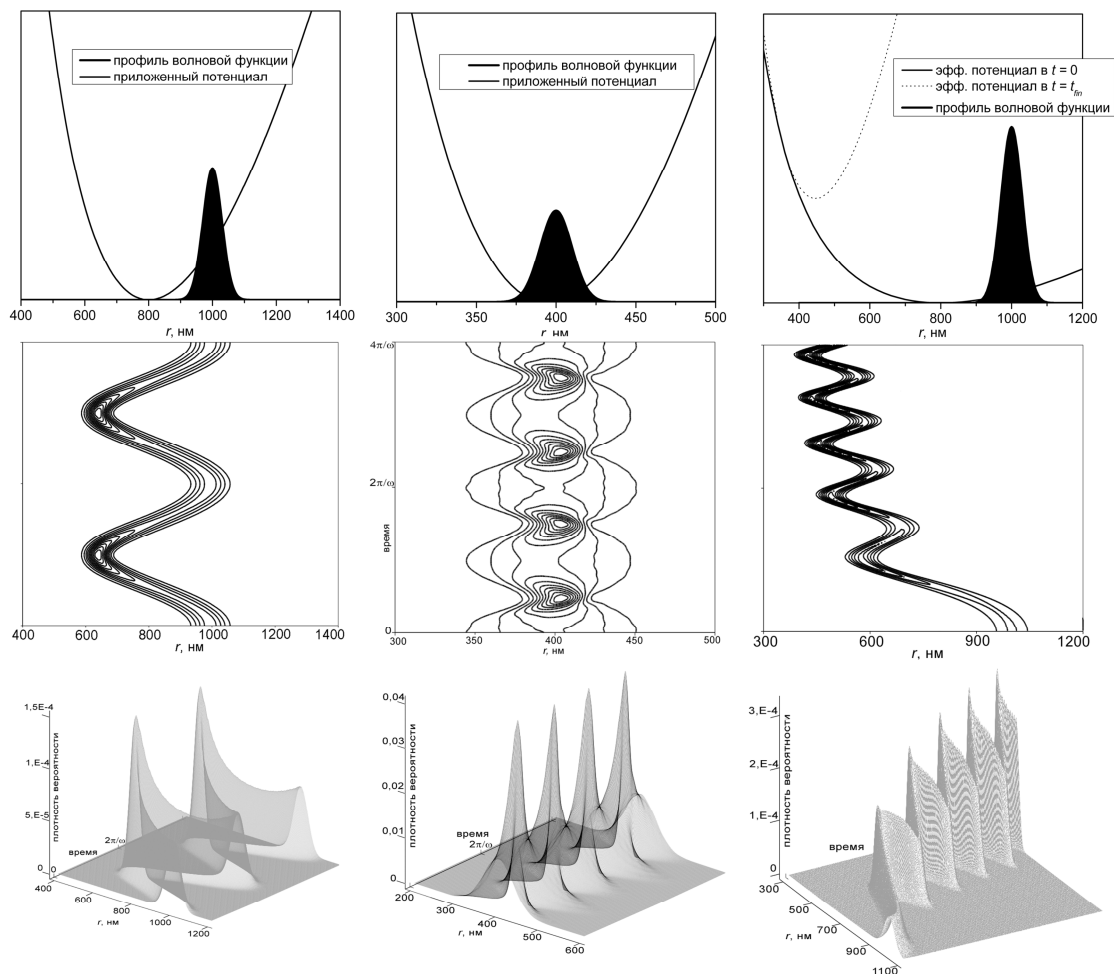


Рис. 2. - К анализу поведения волновых функций в потенциале $V(r)$ для различных значений H . Левый столбец рисунков соответствует нулевому магнитному полю, центральный – сильному магнитному полю (10^4 Гс), правый – нарастающему магнитному полю (от 0 до 10^4 Гс). Показаны графики плотностей вероятности (карты изолиний и поверхности).

Для контроля погрешности используемых численных методов, а также метода расщепления по физическим факторам рассматриваются следующие величины:

$$\|\psi\|^2 = \int_{R_1}^{R_2} |\psi(r)|^2 dr - \text{квадрат нормы волновой функции};$$

$$D = \left(\int_{R_1}^{R_2} |P_T - P_0| dr \right)^{1/2} - \text{разность плотностей вероятности,}$$

характеризующая сохранение положения и формы волнового пакета через период колебаний в эффективном потенциале.

Симметричная схема и метод Нумерова, имеющие второй порядок точности аппроксимации по времени, не воспроизводят детали колебаний центра волнового пакета в магнитном поле, а дают лишь описание общего характера колебаний в потенциале (рис. 3). В методе расщепления по физическим факторам наряду с колебаниями в потенциале воспроизводится и детальная динамика колебаний в магнитном поле.

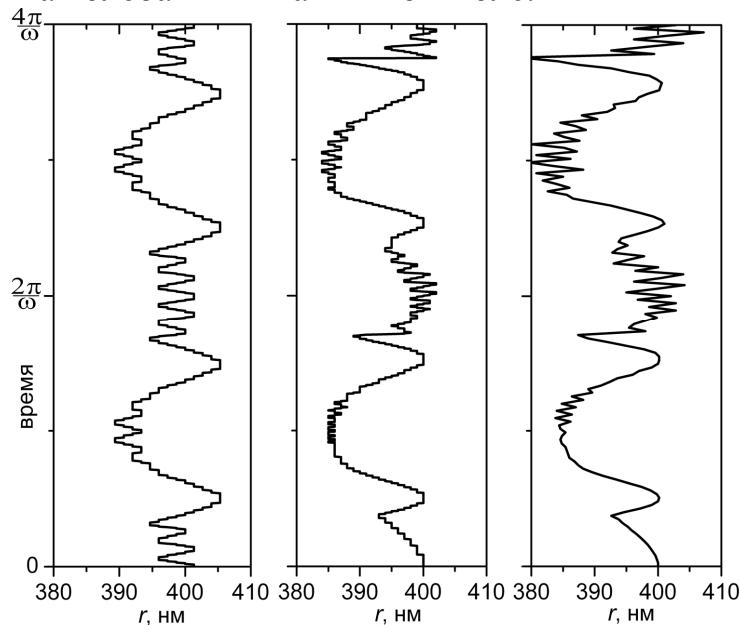


Рис.3. Траектории центра волнового пакета для случая $H = 10^4$ Гс. Слева: расчет по методу расщепления по физическим факторам; в центре: расчет с использованием симметричной схемы; справа: расчет по методу Нумерова.

В таблице 1 приведены данные о параметрах расчета (расчёты проводились на персональном компьютере с процессором AMD Duron 1300 Гц, ОЗУ 640 Мб в системе Mathcad 13), использованных в каждом из трёх вариантов выбора метода и уровня достижимой точности. Эти данные иллюстрируют возможности использования перечисленных методов с точки зрения затраченного на расчет времени и использованной памяти (размеры массивов). Согласно данным таблицы, затраты времени у всех методик сопоставимы и не представляют существенных ограничений, в то же время требуемый объём памяти существенно возрастает в расчетах с использованием численных схем. При фиксированном и сравнительно небольшом объёме оперативной памяти неоспоримые преимущества имеет метод расщепления по физическим факторам.

Кроме того, в результате проведенного сравнения было выявлено, что квадрат нормы волновой функции сохраняется при расчетах с массивами данных, представленных в таблице 1. Максимальное отклонение от единицы составляет 0,0002. Значения величины D в случае сильного магнитного поля

особенно велики для численных методов (до 0,19), в то время как метод расщепления по физическим факторам демонстрирует высокий уровень точности $D < 10^{-4}$.

На основе результатов работ В.А. Абилова, Ф.В. Абиловой и М. К. Керимова в диссертации проводится априорная оценка точности суммирования рядов Фурье в (7) и (9) и сопоставляется с апостериорной оценкой точности воспроизведения инвариантов: сохранения нормы волновой функции и воспроизведения профиля плотности вероятности при колебаниях в магнитном поле.

Кроме того, предлагается процедура использования метода для моделирования трехмерных квантовых колец. Приводятся примеры расчетов поведения частиц в исходном потенциале следующего вида:

$$V(r, z) = a_1 / r^2 + a_2 r^2 - V_0 + a_3 z^2 / 2; \quad r \in (0; \infty); \quad z \in (-\infty; \infty). \quad (11)$$

Временная динамика волновых функций электронов трехмерных квантовых колец может быть проанализирована на основе расчетов для двумерных случаев. Следует отметить, что особую роль при интерпретации результатов играет взаимное расположение минимума эффективного потенциала, учитывающего влияние магнитного поля, и начальное расположение волнового пакета в потенциале.

В практически интересных задачах туннелирования электронов в наноструктурах для использования метода расщепления по физическим факторам необходимо переходить к потенциалам с ограничением пространственного движения частицы. В таком случае аналитическое решение получить уже не удастся.

В третьей главе обсуждается процедура построения базисных функций для использования в методе расщепления по физическим факторам, что предполагает замену исходного потенциала потенциалом ограниченного типа:

$$V_{\text{mod}}(r) = \begin{cases} a_1 / r^2 + a_2 r^2 - V_0, & r \in [R_1, R_2]; \\ \infty, & r \notin [R_1, R_2]. \end{cases} \quad (12)$$

Потенциалы такого рода описывают квантовые объекты с компактным носителем. С математической точки зрения это означает замену граничных условий в нуле и на бесконечности на условия на конечном интервале с сохранением формы потенциала в рассматриваемой области.

Предлагаемый подход основан на специальном выборе пробной функции

$$\psi_{\text{var}}(\alpha r) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\alpha r}{\lambda} \right)^{M(m)} \exp \left(-\frac{(\alpha r)^2}{4\lambda^2} \right) {}_1F_1 \left(-n, M(m) + 1; \frac{(\alpha r)^2}{2\lambda^2} \right); \quad (13)$$

для расчетов вариационным методом. При таком выборе пробной функции схема расщепления остается неизменной и сохраняется симметрия системы. Здесь α - вариационный параметр.

Энергия системы определяется согласно общим положениям вариационного метода:

$$E_{\text{var}} = \min_{\tau} \int \psi_{\text{var}}^* \hat{H} \psi_{\text{var}} d\tau, \quad (14)$$

где τ – область определения волновой функции, $\hat{H}$ – гамильтониан, выбранный согласно (1). Как обычно, в этом случае энергия будет специальным образом зависеть от вариационного параметра α . Вид подобных зависимостей для рассматриваемой задачи представлен на рисунке 4.

Для поиска вариационного параметра обычно применяется условие вида $\frac{\partial E_{\text{var}}}{\partial \alpha} = 0$. Кроме того, волновая функция должна обращаться в нуль на границах интервала. Такое поведение обусловлено запретом попадания частицы в недоступную область. Поэтому на рисунке 4 дополнительно отмечены интервалы значений α , использование которых сохраняет функцию ψ_{var} внутри допустимой области. Соответственно, минимальное значение α из отмеченной области будет являться искомым значением.

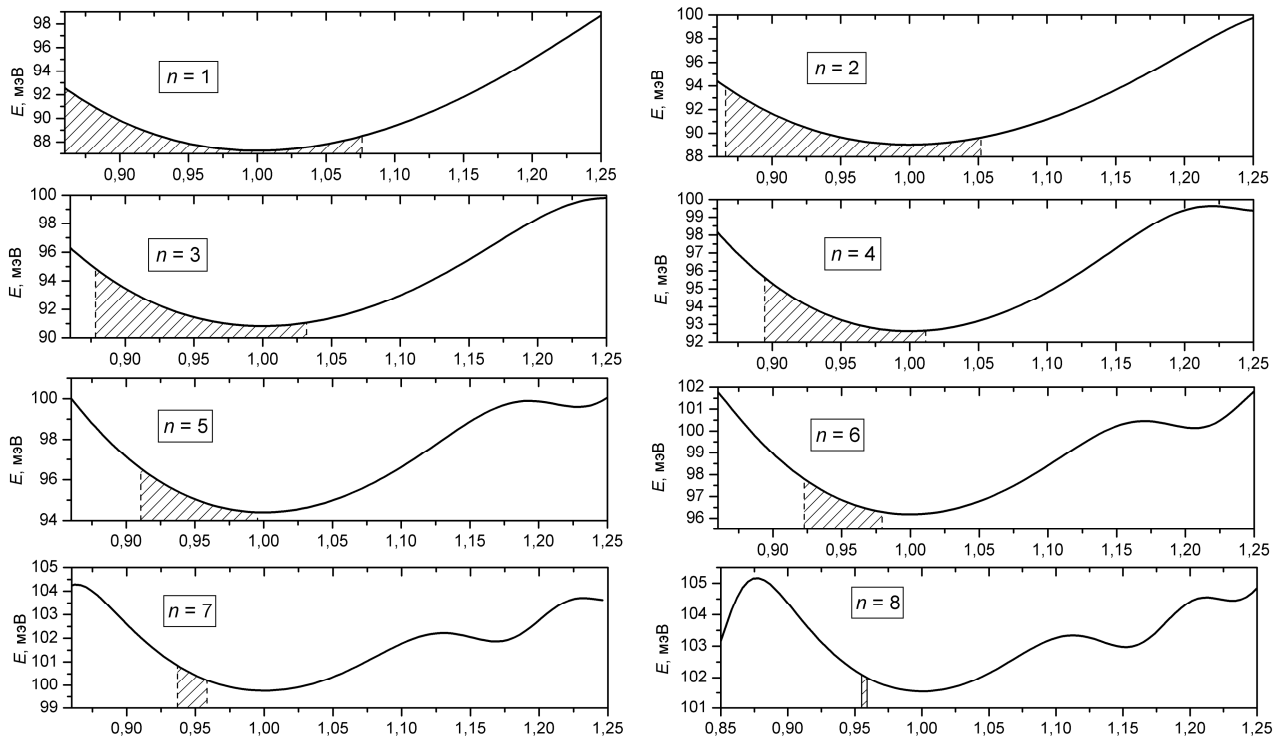


Рис. 4. - Зависимость энергии от вариационного параметра α для разных n для области с границами от 280 до 600 нм. Отдельно выделены интервалы, удовлетворяющие граничным условиям для волновой функции.

Важной характеристикой формируемого базиса является ортогональность волновых функций. Этого можно достичь, зафиксировав α для всех зависимостей $E_{\text{var}}(n, \alpha)$. С ростом n пространственная область, занимаемая функцией ψ_{var} , существенно возрастает, так, что для некоторого $(n_{\text{max}}+1)$ граничные условия не будут удовлетворены ни при каких α . Поэтому необходимо установить значение n_{max} , а затем определить α из рассчитанной зависимости $E_{\text{var}}(n_{\text{max}}, \alpha)$. Для зависимостей, показанных на рисунке 4, такими оптимальными значениями являются $n_{\text{max}} = 8$, $\alpha = 0.956$.

При использовании потенциала V_{mod} изменяется структура энергетических уровней. Она может быть согласована с применением вариационного базиса на основе оптимального выбора вариационного параметра α . Возникающие изменения в структуре энергетических уровней иллюстрирует таблица 2. Наблюдаемые изменения в положениях уровней находятся в согласии с общей идеологией управления характеристиками квантовых систем, предлагаемой в работах Б. Н. Захарьева.

Таблица 2. Уровни энергии, полученные для разных размеров компактных систем. Для случая с граничными условиями в области от 280 до 600 нм может быть получено только 9 уровней энергии с помощью вариационного метода.

Гр. условия	$H = 0$ Гс		$H = 10^4$ Гс			
	$[0; \infty)$	200-1400 нм	$[0; \infty)$	50-750 нм	230-550 нм	280-600 нм
n	E_{exact}	E_{var}	E_{exact}	E_{var}	E_{var}	E_{var}
0	0.2248	0.2248	85.4664	85.4664	86.6646	85.9357
1	0.6745	0.6745	87.2530	87.2530	88.4699	87.7296
2	1.1241	1.1241	89.0396	89.0396	90.2753	89.2536
3	1.5737	1.5737	90.8262	90.8262	92.0807	91.3175
4	2.0233	2.0233	92.6127	92.6128	93.8861	93.1115
5	2.4730	2.4729	94.3993	94.3993	95.6914	94.9054
6	2.9226	2.9226	96.1859	96.1859	97.4968	96.6994
7	3.3722	3.3722	97.9725	97.9725	99.3022	98.4933
8	3.8219	3.8219	99.7591	99.7591	101.1076	100.2872
9	4.2715	4.2715	101.5456	101.5457	102.9129	-
10	4.7211	4.7211	103.3322	103.3223	104.7183	-
11	5.1708	5.1708	105.1188	105.1190	106.5236	-
12	5.6204	5.6204	106.9054	106.9054	108.3292	-

Алгоритм расчета базисных функций (реализованный в модуле А, показанном на рисунке 1):

- 1) Выбор пробной функции $\psi_{\text{var}}(n, \alpha)$.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Поиск максимального значения n .
- 4) Для найденного n_{max} построение зависимости

$$E_{\text{var}}(n_{\text{max}}, \alpha) = \min_{\tau} \int \psi_{\text{var}}^* \hat{H} \psi_{\text{var}} d\tau.$$

- 5) Нахождение α из уравнения

$$\partial E_{\text{var}}(n_{\text{max}}, \alpha) / \partial \alpha = 0.$$

- 6) Расчет ψ_{var} и E_{var} для $n \leq n_{\text{max}}$.

Таким образом, используя полученные значения уровней энергии и соответствующие собственные функции, можно рассчитать временную эволюцию компактной системы.

В четвертой главе на примере «двумного» потенциала демонстрируется работа квантового устройства, состоящего из двух concentric квантовых колец и управляемого магнитным полем.

Если рассматривать «двумный» потенциал в цилиндрической геометрии, то такая модель в определенной степени будет воспроизводить систему двух коаксиально расположенных квантовых колец.

Первый этап расчетов состоит в получении собственных волновых функций и собственных значений энергии для «двухямных» потенциалов вида:

$$U(r) = \begin{cases} \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, & r \leq x_0; \\ \frac{a_3}{r^2} + a_2 r^2 - V_1, & r > x_0; \end{cases} \quad (15)$$

где x_0 – точка сшивки. Решение стационарного уравнения Шредингера производится согласно процедуре, описанной во второй главе. Значения уровней энергии для области, состоящей из двух потенциальных ям, находятся в результате численного решения нелинейных уравнений, получаемых из комплекса стандартных условий, накладываемых на волновую функцию. Для моделирования туннелирования электронов в таком потенциале в магнитном поле было подготовлено 22 набора по 36 собственных функций и значений энергии.

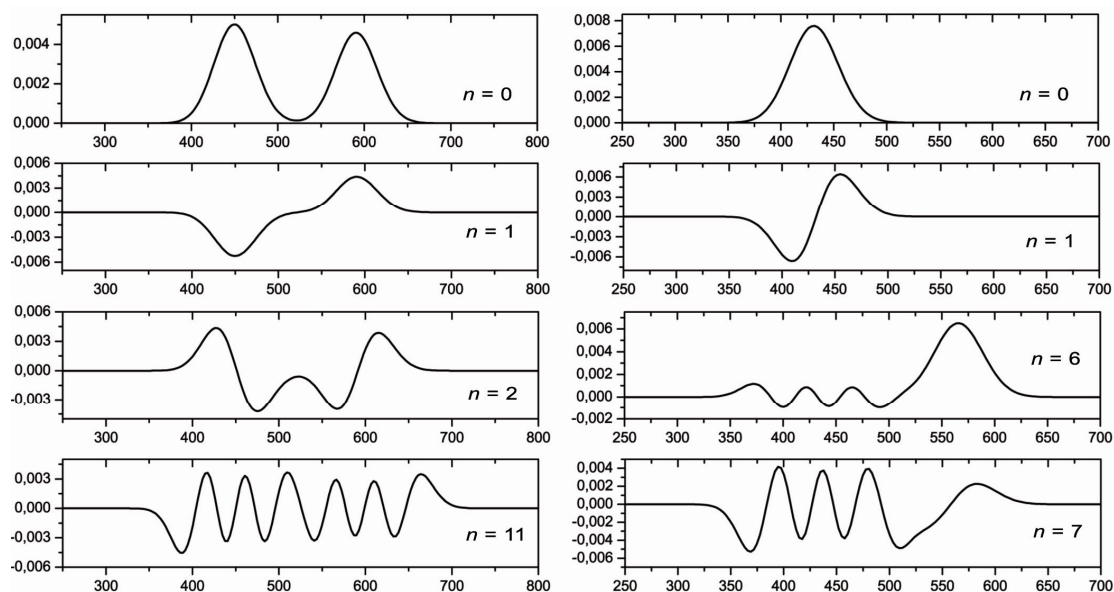


Рис. 5. - Избранные волновые функции электронов для слабого магнитного поля (слева) и сильного магнитного поля (справа).

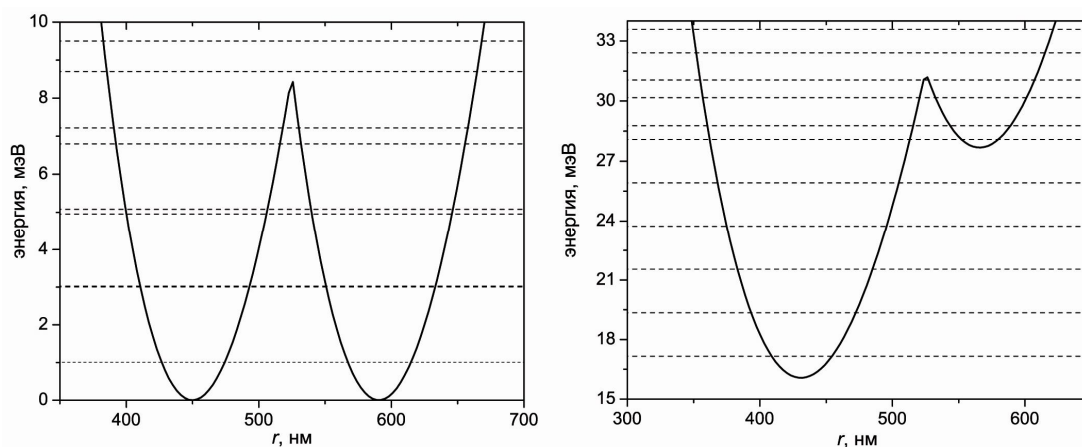


Рис. 6. - Эффективный потенциал $U(r)$ в слабом и сильном магнитном поле. Горизонтальными штриховыми линиями отмечены уровни энергии.

В процессе проведения вычислительных экспериментов в различных условиях были выполнены оценки качества полученных наборов базисных функций, их полноты и погрешностей, связанных с обрыванием рядов в разложениях по базисным функциям. Данный этап работы является наиболее трудоемким. Основные проблемы связаны с вычислением значений вырожденных гипергеометрических функций, входящих в состав базисных функций с высокими значениями квантовых чисел, в интегрированных математических пакетах. Рассчитанные волновые функции и уровни энергии представлены на рисунках 5 и 6.

Таким образом, чтобы воспроизвести временную динамику волновых функций электронов в «двухмном» потенциале и продемонстрировать возможности управления положением волнового пакета в подобной системе с помощью магнитного поля, необходимо решить задачу на собственные значения для представительного набора значений магнитного поля как параметров. Полученная таким образом совокупность наборов собственных значений энергии и базисных собственных функций может быть затем использована в методе расщепления по физическим факторам для решения нестационарного уравнения Шредингера.

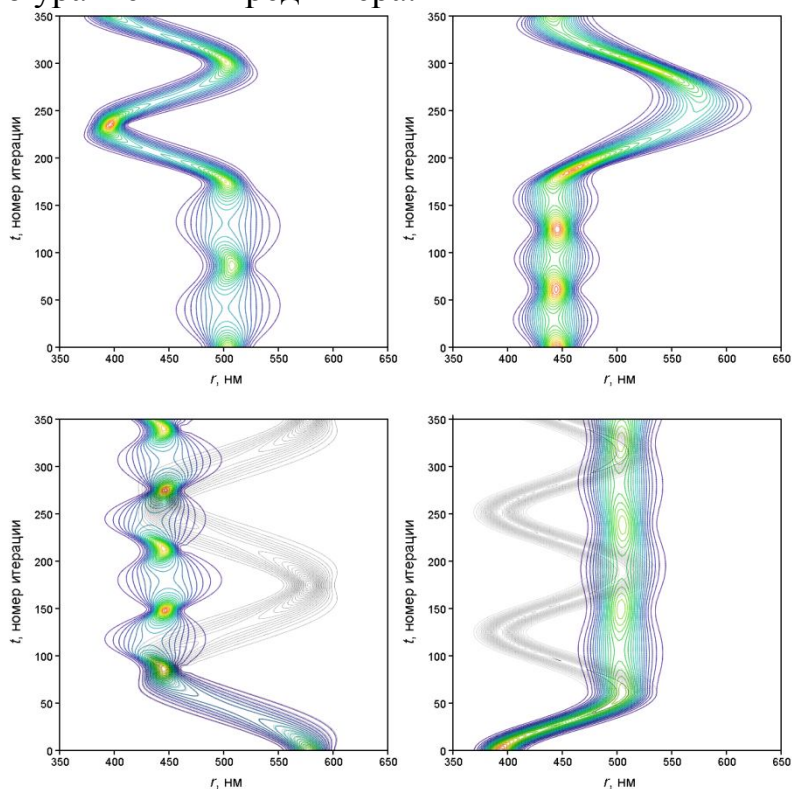


Рис. 7. - Управление локализаций волновых функций электронов с помощью магнитного поля в потенциале (2).

На основе расчетов временной динамики можно сформулировать особенности процессов туннелирования в такой системе. Во-первых, система изначально предрасположена к туннелированию из внешнего во внутреннее кольцо, и с включением магнитного поля эта тенденция усиливается. Во-вторых, туннелирование волнового пакета более вероятно при наличии осцилляций в системе; чем больше амплитуда осцилляций, тем выше

вероятность туннелирования через барьер, разделяющий систему. В-третьих, вероятность туннелирования определяется формой эффективного потенциала и в значительной степени зависит от начальной точки движения волнового пакета.

Управление положением волнового пакета в пространстве можно продемонстрировать на примере стандартного «одномного» потенциала квантового кольца вида $V(r)$ с помощью переключения магнитного поля (рис. 7). В зависимости от желаемого результата, можно либо выводить волновой пакет из равновесного состояния, либо «гасить» колебания в системе, как с помощью включения, так и выключения магнитного поля.

Таким образом, согласуя сведения о локализации волнового пакета в «одномном» потенциале и данные о туннелировании в «двумном» системе, моделируется управляемый перевод волнового пакета из внутреннего кольца во внешнее (рис. 8) и обратно. Полученные результаты свидетельствуют о достаточно хороших итоговых характеристиках: основная часть волнового пакета сосредотачивается в необходимой области пространства.

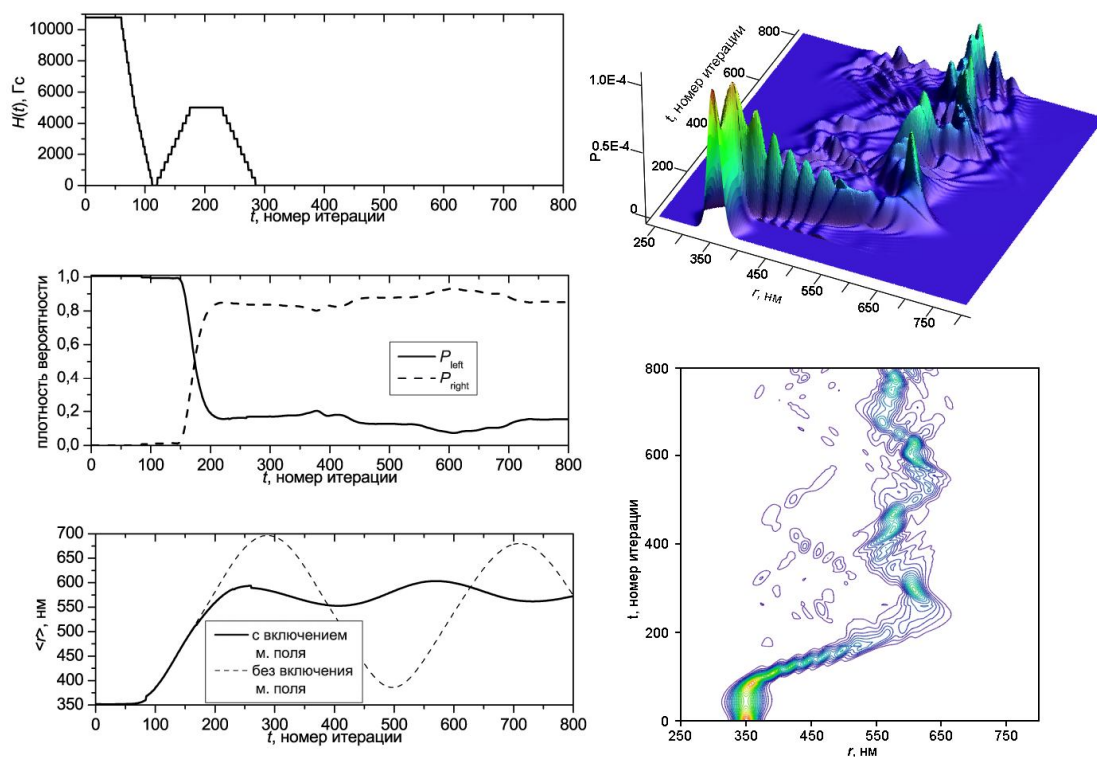


Рис. 8. - Управляемое туннелирование электрона из левой части области действия «двумного» потенциала в правую. Показаны слева: изменение напряженности магнитного поля во времени, плотностей вероятности нахождения в левой и правой части потенциала во времени, средней координаты центра волнового пакета во времени. Справа: плотность вероятности (трехмерный график); и карта изолиний.

В заключении сформулированы основные результаты работы, выносимые на защиту.

Основные результаты

Основные результаты, полученные в диссертационной работе:

- 1) Смоделирована работа возможного квантового устройства, состоящего из двух концентрических квантовых колец и управляемого магнитным полем.
- 2) Предложено семейство специальных схем для метода расщепления по физическим факторам для решения нестационарной задачи туннелирования электронов в концентрических квантовых кольцах.
- 3) Для расчетов временной динамики волновых функций электронов низкоразмерных систем разработан программный комплекс TiDyCal.
- 4) На основе анализа полученных зависимостей энергии от вариационного параметра реализован алгоритм построения базиса для использования в методе расщепления по физическим факторам.
- 5) Разработан программный модуль для расчета собственных волновых функций и значений уровней энергии для «двумного» потенциала при различных значениях напряженности магнитного поля.

Основные результаты диссертации опубликованы:

в журналах из Перечня ВАК:

1. Брызгалов А. А. Метод расщепления по физическим факторам в задаче о временной динамике волновых функций электронов двумерного квантового кольца / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Математическое моделирование. - 2010.- т.22, №6. - С. 15-26.
2. Брызгалов А. А. Построение базисных функций для вычислений методом расщепления по физическим факторам в области конечного размера / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Вычислительные методы и программирование. - 2010. - т.11. - С. 289-298.
3. Брызгалов А. А. Двумерное квантовое кольцо: влияние магнитного поля на временную динамику волновых функций электронов / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2010. - №3/2 - С. 31-36.
4. Брызгалов А. А. Временная динамика волновых функций электронов трехмерного квантового кольца в переменном магнитном поле / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Вест. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. - 2011. - №1 (22). - С. 291-296.
5. Брызгалов А. А. Управление туннелированием в системе двух концентрических квантовых колец с помощью магнитного поля / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Вычислительные методы и программирование. - 2011.- т. 12. - С. 262-274.

в трудах российских и международных конференций:

1. Брызгалов А. А. Временная динамика волновых функций электронов двумерного квантового кольца при включении магнитного поля / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Тезисы докладов Региональной Студенческой Конференции «Математическое Моделирование», г. Обнинск, 18 – 19 мая 2006. – С. 4.
2. Брызгалов А. А. Временная динамика волновых функций электронов 2D квантового кольца в переменном магнитном поле / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Тезисы докладов «Международной конференции по математической физике и её приложениям», Самара, 8-13 сентября, 2008. – С. 41.
3. Брызгалов А. А. Влияние переменного магнитного поля на эволюцию волновых функций электронов двумерного квантового кольца / Брызгалов А. А. // Тезисы докладов 2-й Научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых специалистов «Информационные системы и технологии 2009», Обнинск, 15 мая 2009. – С. 48.
4. Брызгалов А. А. Двумерное квантовое кольцо: влияние магнитного поля на временную динамику волновых функций электронов / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Тезисы докладов 2-й Всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях». Москва, 27-29 мая, 2009. - С. 321-322.
5. Брызгалов А. А. Временная динамика волновых функций электронов трехмерного квантового кольца при воздействии магнитного поля / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Тезисы докладов 7-й национальной конференции «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии», Москва, 16-21 ноября 2009. – С. 473.
6. Брызгалов А. А. Разработка и использование вариационного базиса в задачах с ограниченным движением частиц / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Материалы конференции «Математическая физика и её приложения». Вторая международная конференция (Самара, 29 августа - 4 сентября 2010 г.), Самара: Издательство "Книга", 2010. - С. 66.
7. Брызгалов А. А. Моделирование процессов туннелирования электронов в потенциале двух квантовых колец, находящихся в магнитном поле / Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. // Тезисы докладов. «Математические идеи П. Л. Чебышёва и их приложение к современным проблемам естествознания». V Международная конференция (Обнинск, 14-18 мая 2011 г.), Обнинск: ИАТЭ НИЯУ МИФИ, 2011. - С.17.