УДК 538.955+538.975

В.М.Бурдейний,
В.Х.Касіяненко

КВАНТОВІ ПЕРЕХОДИ В ОДНІЙ ТОЧНО РОЗВ′ЯЗУВАНІЙ МОДЕЛІ АДІАБАТИЧНОГО РОЗШИРЕННЯ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Досліджується миттєве розширення двовимірної квантової точки з непроникними стінками. Нестаціонарне рівняння Шредінгера розв'язується розкладом хвильової функції по базису, яким вибрано систему власних функцій стаціонарного хвильового рівняння при прямокутній геометрії квантової точки. Одержано у явній формі точні вирази для амплітуд квантових переходів і встановлено основні властивості цих амплітуд, що дозволяє прогнозовано маніпулювати станами квантової точки.

Ключові слова: квантова точка; адіабатичне розширення; нестаціонарне рівняння Шредінгера; амплітуди переходів..

Abstract

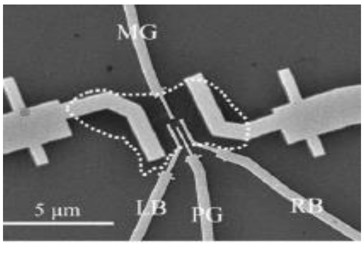
The instantaneous expansion of a two-dimensional quantum dot with impermeable walls has been investigated. The non-stationary Schrödinger equation is solved by the expansion of the wave function on the basis, which was chosen as the system of stationary wave equation eigenfunctions correspondent to the rectangular geometry of quantum dot. Exact expressions for the amplitudes of quantum transitions have been obtained in its explicit form and the main properties of these amplitudes have been determined. These results allow predictably manipulating by states of a quantum dot with applying instantaneous expansion.

Key words: quantum dot, adiabatical expansion; non-stationary Schrödinger equation; amplitude of transitions.

Розвиток технології збудження і реєстрації швидкоплинних процесів привертає увагу до задач квантової механіки, які ще три-чотири десятки років тому викликали лише академічний інтерес. В першу чергу це стосується розширення чи стиск електронного газу під дією фемтосекундного лазерного випромінювання. Тривалість імпульсу настільки мала, що має місце адіабатична зміна квантового стану частинок. В такий спосіб можна маніпулювати розмірами квантових об′єктів і відповідно їх енергетичним спектром. Динаміка частинки стає суттєво нестаціонарною, а тому її рух має бути описаний у термінах нестаціонарного рівняння Шредінгера.

Слід зауважити, що навіть у стаціонарному випадку для дослідження квантових станів необхідно звертатись до наближених методів. Тим більший інтерес становлять ті задачі, в яких динаміка описуються точними результатами.

Тут розглядається модель двовимірної квантової точки у вигляді стовпця з поперечним перерізом у вигляді прямокутника. Енергетичний спектр носіїв визначається власними значеннями стаціонарного хвильового рівняння. У наближені жорсткого конфайнменту з краєвими умовами Діріхле це рівняння допускає застосування методу розділення змінних, що приводить до енергетичного спектру у вигляді сукупності розмірно квантова них рівнів. Як правило, висота стовпчика настільки мала, що заповненим є лише основний стан квантування у напрямі осі росту квантової точки. Рух електронів, які заповнюють цю підзону є ефективно двомірним. Саме вони формують двомірну квантову точку. На Рис.1 показані мікрофотографія, а на Рис.2-схематичний розріз квантової точки, створеної за згаданою вище технологією up-down[1]



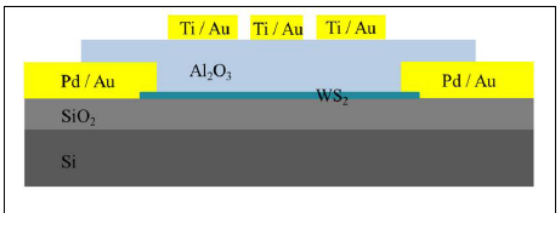


Рис.1 Квантова точка на основі сульфату вольфраму.

Рис.2 Схематичний розріз квантової точки поданої на Рис.1

В моделі жорсткого конфайнменту, яка тут розглядається, квантова точка формується електричними полями, які прикладені до електродів, геометрія яких і визначає форму точки. Розміри квантової точки змінюються за рахунок зміни напруженості утримуючих полів. Характерний час релаксації носіїв за порядком величини складає $\sim 10^{-9}$ с. Застосовуючи модуляцію імпульсом фемтосекундного лазера . можна змінити розміри за характерний час $\sim 10^{-14}$ с. Порівняння вказаних часів показує, що технічно можливо здійснити розширення квантової точки. яке має миттєвий характер.

За рахунок зміни розмірів часі динаміка носіїв повинна описуватися нестаціонарнм рівнянням Шредінгера

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t) \qquad (1)$$

з відповідними краєвими і початковою умовами. Різниця в електронних спорідненостях матеріалу квантової точки і матриці складає величини $\sim 0{,}1 \div 1$ еВ. що суттєво перевищує енергію основного стану розмірного квантування. Тому за межами точки хвильова функція експоненційно згасає, в силу чого можна вважати. що на межі квантової точки хвильова функція повинна підкорятися умовам Діріхле. До розширення квантова точка перебуває в одному із своїх стаціонарних станів. Саме хвильова функція цього стану і повинна розглядатися як початкова умова. Отже, розв′язки нестаціонарного рівняння (1) слід знаходити на просторі функцій, які задовольняють умовам:

$$\Psi(\vec{r},t)\Big|_{\vec{r}\in\Gamma} = 0 \qquad (2) \qquad \Psi(\vec{r},t)\Big|_{t=0} = \Psi_{initial} \qquad (3)$$

Подальші викладки вимагають конкретизації моделі квантової точки. Нами досліджувалися квантові переходи в найпростішій моделі, яка допускає точні розв′яки задачі (1)-(3). Квантова точка до розширення має форму прямокутника розмірами $a \times b$. Коефіцієнти розтягу покладаються рівними λ і μ так ,що після розширення зберігається прямокутна геометрія точки з новими розмірами $\lambda a \times \mu b$. Має зміст зауважити, що відповідна проблема для кругової геометрії вивчалася в роботі [2].

Для розв′язання нестаціонарного рівняння (1) застосовується загальна процедура розкладу шуканої функції в ряд по розв′язках стаціонарного рівняння Шредінгера, тобто:

$$\Psi_{rp}(\vec{r},t) = \sum_{n,m} C_{rp,nm}(t)\Psi_{nm}(x,y) \qquad (4)$$

де $r,p-$квантові числа початкового стану, а $\Psi_{nm}(x,y)-$добре відомі [3] ортонормовані хвильові функції квантової точки після її розширення. Саме обчислення і аналіз коефіцієнтів розкладу і є метою даної роботи.

Підстановка розкладу (4) в (1) і проектування на систему базисних функції $\Psi_{nm}(x,y)$ щодо коефіцієнтів розкладу приводить до наступного рівняння:

$$i\hbar\partial_t C_{rp,nm} = E_{nm}C_{rp,nm} \qquad (5)$$

в якому $E_{nm}-$енергії стаціонарних станів прямокутної квантової точки після її розширення.
Початкові умови для рівняння (5) одержуються комбінуванням (5) і (3)
Повторне проектування на систему базисних функцій дає

$$C_{rp,nm}(t) = C_{rp,nm}(0)e^{i(E_{nm}/\hbar)t} \qquad (6)$$

де постійна інтегрування рівняння (5) виражається формулою:

$$C_{rp,nm}(0) = \int_{-a/2}^{a/2}dx\int_{-b/2}^{b/2}\Psi_{rp}(x,y)\Psi^*_{nm}(x,y)dy \qquad (7)$$

Важливо, що система базисних функцій визначена на області, яка відповідає квантовій точці після розширення, Проте, у формулі (7) виконується інтегрування по області, яку заповнювала точка до розширення. Саме у цьому полягає ключова особливість миттєвого розширення, згідно із якою в початковий момент часу, як тільки знімається конфайнмент-тобто непрозорі стінки квантової ями пересуваються до своїх нових позицій у просторі, хвильова функція початкового стану продовжує бути рівна нулю за межами ями, що пояснює межі інтегрування у форулі (7).

В силу симетрії квантової точки хвильові функції початкового стану класифікуються як симетричні чи антисиметричні щодо інверсії. Прямі обчислення за формулою (7) показують, що переходи між станами з протилежною парністю заборонені в тому розумінні,що відповідні коефіцієнти дорівнюють нулю. Дозволеним є лише переходи між симетричними станами або антисиметричними. Відповідні амплітуди обчислюються підстановкою відомих власних функцій у формулу (7) з подальшим інтегруванням простих тригонометричних функцій. Зокрема амплітуди квантових переходів між симетричними станами одержана у такому вигляді:

$$C^{s}_{rp,nm}(0)=\frac{4(-1)^{r+p}}{\pi^2\sqrt{\lambda\mu}}\frac{(2n+1)/\lambda}{(2r+1)^2-[(2n+1)/\lambda]^2}Cos[\pi(2n+1)/2\lambda]\times$$
$$\times\frac{(2m+1)/\mu}{(2p+1)^2-[(2m+1)/\mu]^2}Cos[\pi(2m+1)/2\mu] \qquad (8)$$

Амплітуди переходів між антисиметричними станами мають таку ж саму структуру, лише замість непарних цілих чисел слід підставити парні.

Відповідні ймовірності переходів обчислюються як квадрати модулів амплітуд. визначених у даній роботі формулою (8) і її аналогом для антисиметричних станів.

В першу чергу слід відзначити, що амплітуди переходів факторизуються-розширення вздовж однієї з осей не впливає на переходи, пов'язані з розширенням вздовж іншої осі. Амплітуди переходів мають осцилюючий характер. нарешті, для будь-якого коефіцієнта гомотетії існує квантовий стан, переходу в який відповідає максимальна ймовірність. Зі співвідношення (8) виливає, що це саме той квантовий стан, енергія в якому рівна або близька до енергії початкового стану.Має зміст також зауважити, що поєднанням формул (8) , (6) і (4) хвильова функція одержується у явній формі, що відкриває можливості для обчислення всіх квантових характеристик, наприклад, середньої енергії , компонент імпульсу, середнього квадратичного відхилення і т. п,, тобто всіх величин, похідних від хвильової функції.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1.Hartmann Uwe, Fasgination Nanotechnologies, Verlag, 2006, pp.173

2.Burdeynyy V.- Chernysh V., Expanção instantânea de um ponto quaníco, Resumos de Conferencia International "Ciência e Technologias",Maputo,Moçambique, 2016, 21-34

3.Ландау Л.Д.,Лифшиц Е.М., Квантовая механика, нерелятивистская теория, Физматиздат, М., 1963. 702

.

Бурдейний Володимир Мефодійович,*кандидат фізико-математичних наук,доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця. brdnvldmr@ukr.net*

Касіяненко Василь Харитонович, *доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.*

Burdeynyy Volodymyr Mefodiyovych, *PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia , brdnvldmr@ukr.net*

Kassiyanenko Vasul Kharutonovuch*, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, professor, Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia .*