На правах рукописи

БАГМАНОВ Андрей Тамерланович

ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНА В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург - 2005

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Многие проблемы в физике атомов и молекул, конденсированной среды, а также в нанотехнологиях и информатике сводятся к динамике волновых пакетов электрона в квантовых ямах. Квантовая яма с непроницаемыми стенками, гармонический и нелинейный осцилляторы в пространственно-ограниченной системе, классические резонансы, квантовые системы с заданным распределением потенциала на конечном промежутке, заключенном между непроницаемыми стенками, таят множество сюрпризов и невыясненных свойств. В последние годы отмечается существенный рост исследований и публикаций в этих областях. Они мотивируются логикой развития фундаментальной науки, современными "точными" технологиями, расширяющими возможности научного познания, а также техническими приложениями. Разработка квантовых приборов и компьютеров стоит на повестке дня современной науки и техники. Для решения многих проблем необходимы всесторонние знания о динамике электрона в квантовых ямах. Простейшая квантовая яма, рассматриваемая в квантовой механике – прямоугольная "бесконечно-глубокая яма". В учебниках по квантовой механике традиционно рассматриваются лишь стационарные решения уравнения Шредингера для частицы в такой яме. Нестационарные исследования при заданных начальных условиях стали выполняться в последние годы. Они связаны с изучением квантовых возвратов пакета в исходное состояние, основываются на квантовом аналоге теоремы Пуанкаре о возвратах. Другой объект – пространственно-ограниченный гармонический осциллятор. Здесь ветви параболы квадратичного потенциала ограничены стенками непроницаемой ямы. Квантовые системы с двойными ямами и туннелированием между ними могут быть реализованы на основе современных технологий в полупроводниках, они интенсивно исследуются с целью создания простейших наноустройств. Реальные квантовые системы являются ограниченными по размеру. Квантовая яма конечной глубины может быть исследована при помощи ямы с непроницаемыми стенками. Такой подход рассматривался в литературе. Ограниченные в пространстве квантовые системы с распределенным потенциалом могут быть исследованы с нулевыми граничными условиями на волновую функцию. Исследования квантовых ям со сложным потенциалом требуют применения компьютерных методов. Постановка задач с начальными условиями является актуальной и совершенно необходимой для последовательного изучения квантового движения.

Цели и задачи исследования

1. В последнее десятилетие уделялось заметное внимание волновым пакетам микрочастиц в простых системах: потенциальных ямах или квантовых бильярдах, гармоническому и нелинейному осцилляторах, хаотизации движения. Следует отметить рост числа публикаций, в которых рассматриваются нестационарные уравнения Шредингера и исследуются их решения в различных ситуациях. Однако, теория движения волновых

пакетов микрочастицы, например, электрона все еще разработана недостаточно и односторонне.

2. Необходимо исследовать динамические свойства при разных начальных и граничных условиях, стационарных и импульсных внешних воздействиях, основываясь как на решениях уравнения Шредингера для волновых функций, так и для полевых переменных: плотности и скорости вероятностной жидкости, квантового потенциала. Для изучения структурных свойств пакетов при их эволюции в квантовых системах необходимо исследовать пространственно-временные реализации и их Фурье-спектры, энтропию Шеннона, автокорреляционные функции. Знания о локальных значениях необходимо дополнить исследованиями усредненных по пространству динамических переменных как функций времени, провести сравнение с классическими аналогами этих величин. Только комплексный подход, включающий методы нелинейной динамики и вычислительной математики, может дать более полные представления о квантовых волновых закономерностях, а также о способах управления ими.
3. Хотя классическая теорема о возвратах была сформулирована А. Пуанкаре еще в 1890г., квантовый аналог ее обсуждался в научной литературе в 1957г. [1], ее роль в квантовой механике стала осознаваться лишь в последние годы. Содержание ее составляют возвраты волновых пакетов к исходной форме (состоянию) через характерные квантовые масштабы времени, а также промежуточные состояния в виде коллапсов, фрагментаций. Здесь следует отметить классические и квантовые временные масштабы этих динамических процессов. Они могут быть выражены через соответствующие частоты. Для изучения роли этих масштабов, необходимо исследовать их проявление в виде Фурье-спектров плотности вероятности, а также для средних значений координаты и скорости – как функций времени. Фурье-спектры для временной эволюции средних значений координаты и скорости позволят увидеть связь мелкомасштабных осцилляций с крупномасштабной модуляцией, т.е. различных типов движения.
4. Наряду с временными реализациями для средних, необходимо исследовать пространственные реализации для плотности вероятности в фиксированные моменты времени, их Фурье-спектры, включающие изучение пространственных характерных масштабов, фрагментацию и другие свойства.
5. Используя теорему Эренфеста в ее исходной формулировке и с учетом ее модификации [2], исследовать временную эволюцию пространственных средних для координаты и скорости, а также фазовые портреты для них.
6. Исследовать влияние начальной скорости пакета на временную эволюцию как при отсутствии внешнего воздействия на микрочастицу, так и с учетом различных воздействий для простой квантовой системы с непроницаемыми стенками.
7. Рассматривая воздействие в виде одиночного импульса в течение короткого времени на волновой пакет, исследовать генерацию и формирование квантовых состояний

в потенциальной яме с непроницаемыми стенками, изучить отклик на такое воздействие для плотности вероятности, а также для средних значений координаты и скорости и их Фурье-спектров.

8. Варьируя формы стационарных потенциалов, представляющих внешнее воздействие на пакет микрочастицы в яме, изучить пространственное динамическое сжатие пакетов в определенные моменты времени, и их последующую фрагментацию.
9. Для серии прямоугольных кратковременных импульсов, соответствующих постоянной классической силе воздействия, исследовать условия для классического резонанса в квантовой системе, представляющей пространственно-ограниченный гармонический осциллятор.
10. Для непрерывного сигнала во времени исследовать параметрические резонансы пространственно-ограниченного осциллятора.

11. Для нелинейного осциллятора с двумя потенциальными ямами исследовать временные осцилляции для средних значений динамических переменных и установить характерные временные масштабы.

<u>Научная новизна диссертации</u>

1. Проведены всесторонние и обширные количественные исследования динамики пакетов в квантовых ямах с ангармоническими потенциалами, они включают расчеты локальных динамических переменных, их пространственных средних, Фурье-спектров реализации, сингулярностей. Такой подход дает наиболее полную картину при заданных начальных условиях.
2. Установлены различные по величине временные масштабы (периоды), обусловленные квантовой рефокусировкой (возвратами) и классическим движением. Для иллюстрации масштабов дано аналитическое точное решение уравнения Шредингера с начальным условием в виде тригонометрического пакета с конечной скоростью, проведен спектральный Фурье-анализ решений.
3. Предложен нелинейный механизм сжатия волновых пакетов при ангармонических потенциальных воздействиях на электрон.
4. Изучены классические резонансы волновой динамики в квантовых ямах для пространственных средних значений координаты и скорости. Для параметрических эффектов исследован резонанс и обратное явление – уменьшение средних значений координат и скорости с течением времени. Рассмотрены импульсные и непрерывные сигналы внешнего воздействия.
5. Исследовано кратковременное импульсное воздействие на начальный волновой пакет в квантовой яме и его последующую эволюцию; проведены расчеты при разных длительностях и интенсивностях одиночного импульса.
6. Обсуждается необходимость корректировки теоремы Эренфеста для исключения возможных парадоксов в пространственно-ограниченных системах, дан пример.

7. Проведены расчеты временных масштабов для квантового осциллятора с двойной ямой при начальном условии в форме узкого тригонометрического пакета, распределенного в одной из ям. На основе Фурье-спектров и реализаций установлены характерные частоты, соответствующие разным временным масштабам.

Защищаемые положения

1. Рефокусировка и сжатие волновых пакетов в квантовой яме при внешних воздействиях;
2. Классические резонансы пространственно-ограниченного квантового осциллятора;
3. Генерация мелкоструктурированных волновых пакетов при воздействии одиночным импульсом;
4. Временные масштабы для квантового осциллятора с двойной ямой

Практическая значимость работы. Теоретические исследования и компьютерное моделирование волновой динамики электрона, визуализация расчетов формируют научные представления и базу знаний, необходимую в физике конденсированного состояния, разработках квантовых приборов и в других целях. Разработанный программный продукт может быть использован для последующего исследования теории движения электрона в квантовых ямах, в физике конденсированного состояния, в теории передачи сигналов, а также в учебном процессе.

Достоверность результатов. Достоверность полученных результатов, положений и выводов подтверждается внутренней согласованностью всей совокупности данных качественного анализа и численных расчетов, корректным применением апробированных методов вычислительной математики, квантовой механики и физики конденсированного состояния.

Апробация. Основные результаты и положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

Научно-практическая конференция и школа-семинар (С.-Петербург, 2004) “Формирование технической политики инновационных наукоемких технологий”; VII, VIII, IX Всероссийские конференции “Фундаментальные исследования в технических университетах” (С.-Петербург, 2003, 2004, 2005); XII Международная научно-методическая конференция “Высокие интеллектуальные технологии и генерация знаний в образовании и науке” (С.-Петербург, 2005); на Международной конференции “Лазеры. Измерения. Информация” (С.-Петербург, 2003, 2004, 2005); на Международной конференции “Лазеры для медицины, биологии и экологии” (С.-Петербург, 2002); на VII, VIII Международных рабочих совещаниях “Неразрушающий контроль и компьютерное моделирование в науке и технике” (С.-Петербург, 2003, 2004); на семинарах кафедры “Теоретическая физика” С.-Петербургского государственного политехнического университета.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 16 работах.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографического списка из 70 наименований, содержит 136 страниц текста, иллюстрируется 85 рисунками.

Личный вклад автора

Соискатель принимал участие в постановке ряда задач, проведении качественного анализа и компьютерного моделирования, им полностью самостоятельно выполнены все численные исследования и конкретные расчеты, создано программное обеспечение. Эти результаты позволили сформировать представления о закономерностях волновой динамики в простых квантовых системах при внешних воздействиях на электрон.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В главе I дан критический анализ состояния проблемы квантового движения микрочастицы. Прежде всего, обсуждаются методы описания движения. Используя различные формы для плотности Лагранжиана и вариационный принцип, формулируются квантовые уравнения движения. Они представлены традиционным уравнением Шредингера для комплексной волновой функции, а также связанными уравнениями для вещественной и мнимой частей волновой функции; одновременно обсуждаются квантовые уравнения Гамильтона-Якоби и Маделунга. Эти уравнения, а также уравнения Эренфеста для средних дают наиболее полную картину о динамических свойствах как свободного движения, так и во внешних полях ограниченных в пространстве квантовых систем. Наборы переменных, входящих в эти уравнения, эквивалентность различных подходов позволяют лучше понять квантовую динамику микрочастицы.

Затем, по данным литературы, обсуждаются начальные условия к волновому уравнению Шредингера. Одна из задач квантовой волновой динамики – дифракция во времени. В начальный момент времени пространство «перекрыто» заслонкой и делится ею на левую и правую части. В левой части распределена плоская волна, а в правой части волновой процесс отсутствует. Заслонка «мгновенно» открывается, и в правой части формируется причинно-обусловленный волновой процесс. Он представляет собой дифракцию во времени. Спустя почти полвека после этой пионерской работы, были сформулированы более сложные начальные условия и задачи, включающие туннелирование. Однако, по-прежнему, использовалась идея заслонки, но начальное условие формулировалось в виде суперпозиции двух плоских волн: прямой и обратной со сдвигом фазы. В правой части пространства волна распространялась через барьер. Выбор параметров барьера не был столь абстрактным, он соответствовал реальной технологической структуре из арсенида галлия. Решения уравнения Шредингера при указанном условии хорошо объясняли резонансный механизм туннелирования. В последующих исследованиях это условие использовалось на конечном промежутке. В этом разделе главы кратко рассматриваются граничные условия, зависящие от времени. Начальные условия в форме гауссовых пакетов обсуждаются также. Квантовые волновые пакеты, их эволюция рассматриваются в третьем разделе первой главы. Наряду с работами, где рассматриваются свойства расплывания пакетов в неограниченном пространстве, отмечаются работы, где возможен обратный процесс – сжатие пакетов на определенном этапе эволюции. Основное внимание уделяется гауссовым волновым пакетам, включая важный пример движения волнового пакета в квантовой системе с параболическим потенциалом, т.е. гармонический осциллятор с минимизированным соотношением неопределенностей. Здесь же обсуждаются уравнения для квантово-механических средних, т.е. теорема Эренфеста. Эта теорема используется как метод изучения динамики. Для ограниченных и периодических систем она также может применяться, но при этом возникает необходимость в обобщении и уточнении ее. Реальные квантовые системы имеют конечные размеры. Отражения волнового пакета от границ системы могут приводить к сложной интерференционной картине в распределении плотности вероятности. Частным примером ограниченных квантовых систем является прямоугольная одномерная яма с непроницаемыми стенками.

Квантовые возвраты, классические и квантовые масштабы времени при движении частицы в одномерной прямоугольной яме стали центральной темой в исследованиях последних лет. Для волновой функции были установлены характерные квантовые масштабы времени, когда она возвращается к исходной форме или восстанавливает частично свою форму. В обзоре приведены формулы для характерных масштабов времени и сформулированы теоремы о возвратах. Кроме того, обсуждается метод автокорреляционных функций для анализа эволюции и временных масштабов волновых функций. Эти исследования составляют передний фронт науки в теории конденсированного состояния и квантовой информатики.

Глава вторая посвящена динамике волновых пакетов электрона в квантовой яме с непроницаемыми стенками. В ней анализируются решения уравнения Шредингера для двух видов начальных условий. Одно из них – гауссов пакет с начальной скоростью

$$\Psi\left(0,\zeta\right)=C\cdot\exp\left(-\frac{\zeta^{2}}{2}+i\cdot V_{0}\cdot\zeta\right),\tag{1}$$

где $C\approx 0.7511$ – нормировочный множитель, V_0 – начальная скорость, координата $\zeta\in\left[-\pi,\pi\right]$, i – мнимая единица. Другое условие – тригонометрический пакет

$$\Psi\left(0,\zeta\right)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cdot\cos\left(\frac{\zeta}{2}\right)\cdot\exp\left(i\cdot V_{0}\cdot\zeta\right).\tag{2}$$

Безразмерная координата ζ определяется через атомную единицу длины, либо масштаб, связанный с шириною ямы $2L$. Т.о., при разном выборе базисных единиц начальные условия и уравнение Шредингера остаются неизменными. Это расширяет область применения получаемых результатов. Решение уравнения Шредингера можно представить в виде бесконечного тригонометрического ряда

$$\Psi(\tau,\zeta)=\sum_{m=1}^{\infty}A_m\cdot e^{-i\frac{(2m-1)^2}{8}\tau}\cdot\cos\left(\frac{2m-1}{2}\cdot\zeta\right)+B_m\cdot e^{-i\frac{m^2}{2}\tau}\cdot\sin(m\zeta). \qquad (3)$$

Коэффициенты этого ряда определяются как

$$\begin{aligned}A_m&=\frac{1}{\pi}\cdot\int_{-\pi}^{\pi}\Psi_0(0,\zeta)\cdot\cos\left(\frac{2m-1}{2}\cdot\zeta\right)d\zeta,\\ B_m&=\frac{1}{\pi}\cdot\int_{-\pi}^{\pi}\Psi_0(0,\zeta)\cdot\sin(m\zeta)d\zeta,\qquad m=1,2,3,..\end{aligned} \qquad (4)$$

Для гауссова начального пакета эти интегралы могут быть взяты либо в приближенной аналитической форме, либо численно. Для получения массивов решений использовалось конечное число членов в сумме, равное 700 или 3000. Полученные результаты сравнивались с численным интегрированием уравнения Шредингера, позволяя контролировать оба подхода и степень совпадения решений. Топография уровней плотности вероятности $N(\tau,\zeta)$ как функции координаты ζ и безразмерного времени τ позволяет наблюдать движение пакета, столкновение со стенкой, интерференцию, фрагментацию и собирание пакета к исходной форме. Одновременно проведены расчеты для плотности вероятности как функции координаты при разных τ, дающие представление о формах и возврате в исходное состояние. Зависимость плотности вероятности N в центре ямы как функции времени является наиболее простой, отчетливо выделяются узлы (нули), следующие с периодом 2π. Анализ средних значений координаты $<\zeta>$ и скорости $<V>$ как функции τ, а также траектории $<V>$ как функции $<\zeta>$ демонстрируют колебательные свойства пакета. Для проводимых вычислений здесь и в других задачах контролируется нормировка, здесь отклонение от единицы могло составлять до 0.0006. Вычисление среднеквадратичных величин координаты и скорости, а также произведение их стандартных отклонений позволило изучить эволюцию соотношения неопределенностей. Для гауссова (минимизированного) пакета в $\tau=0$, через $\tau=8\pi$, 16π и последующие периоды произведение равно 0.5. Для $0<\tau<8\pi$ стандартные отклонения σ_ζ,σ_V и их произведение осциллируют. Фурье-спектры для пространственных и временных реализаций N, а также для $<\zeta>$, $<V>$ находятся в соответствии с реализациями.

Отдельные слагаемые ряда являются частными решениями уравнения Шредингера для некоторых начальных условий, изучение их позволяет лучше понять природу рефокусировки. Зависимость мнимой части волновой функции Ψ_β от ее вещественной части Ψ_α в центре ямы, $\zeta=0$, дает картину повторяющихся узлов, где квантовые переменные (локальная полевая скорость, действие, квантовый потенциал) являются сингулярными.

Для тригонометрического пакета (2) коэффициенты ряда выражаются через элементарные функции

$$A_n = \frac{(-1)^m \cdot (2m-1) \cdot V_0 \cdot \sin(V_0 \pi)}{\pi^{3/2} \cdot \left(V_0^2 - m^2\right) \cdot \left[V_0^2 - (m-1)^2\right]},$$
$$B_n = \frac{2i \cdot (-1)^{m+1} \cdot m \cdot V_0 \cdot \cos(V_0 \pi)}{\pi^{3/2} \cdot \left[\left(V_0 - \frac{1}{2}\right)^2 - m^2\right] \cdot \left[\left(V_0 + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2\right]}. \quad (5)$$

Коэффициенты существенно зависят от начальной скорости V_0. Решение (3) с коэффициентами (5) сходится абсолютно и равномерно относительно пар (τ, ζ) из полуполосы $\Pi = [0; +\infty] \times [-\pi; \pi] \subset \mathbb{R}^2$ для значений $V_0 \neq \frac{p}{2}$, $p \in \mathbb{Z}$. При целых и полуцелых V_0 в формулах необходимо совершать предельный переход, пользуясь правилом Лопиталя. Детально рассматривается режим движения при $V_0 = 1$. Исследование топографии, пространственных реализаций N в разные моменты τ, временной зависимости N в центре ямы позволяет получить ряд выводов о временных масштабах. Поведение плотности вероятности как функции координат и времени характеризуется определенным сходством с поведением гауссова пакета с $V_0 = 1$. Центр тяжести пакета вначале движется вправо, затем сталкивается со стенкой, сжимается и движется влево. Через период 8π воспроизводится лишь форма пакета, но скорость его направлена влево; через 16π воспроизводится и направление скорости пакета (вправо), как в $\tau = 0$. Фазовая траектория в плоскости $\langle V \rangle, \langle \zeta \rangle$ имеет сходство в форме для достаточно больших $\langle V \rangle, \langle \zeta \rangle$, расхождение наступает в окрестности $(0; 0)$. Плотность вероятности как функция времени τ в центре $\zeta = 0$ имеет синусоидальный профиль и отличается от первого случая. Фурье-спектр временных реализаций N в $\zeta = 0$ и для средних содержит соответствующие характеристические частоты движения, обусловленные начальной скоростью. Вычисление суммы ряда обрывается на 700-м члене при условии достижения заданной малости члена ряда, увеличение числа членов до 3000 не влияло на результат. Кроме этих прямых расчетов, численное интегрирование системы двух уравнений, связывающих вещественную Ψ_α и мнимую Ψ_β части волновой функции Ψ, также было проведено. Существенных различий в обоих подходах не было. В этой главе также анализируется теорема Эренфеста. Традиционная формулировка ее может оказаться некорректной. Это можно проиллюстрировать на примере квантовой системы с периодическими граничными условиями:

$$\Psi(\tau, -\pi) = \Psi(\tau, \pi), \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \zeta}(\tau, -\pi) = \frac{\partial \Psi}{\partial \zeta}(\tau, \pi). \quad (6)$$

Для волновой функции $\Psi(\tau,\zeta)$, удовлетворяющей этим условиям и уравнению Шредингера, например

$$\Psi(\tau,\zeta)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\cdot\left[e^{i\left(\zeta-\frac{\tau}{2}\right)}+e^{2i(\zeta-\tau)}\right] \quad (7)$$

мы имеем

$$<\zeta>=\sin\frac{3\tau}{2},\ <V>=\frac{3}{2},\ \frac{d}{d\tau}<\zeta>=\frac{3}{2}\cos\frac{3\tau}{2}. \quad (8)$$

Плотность тока вероятности J и ее значения на краях принимают вид

$$J=\frac{3}{2\pi}\cos^2\left(\frac{\zeta}{2}-\frac{3\tau}{4}\right),\quad J(\tau,\pm\pi)=\frac{3}{4\pi}\cdot\left(1-\cos\frac{3\tau}{2}\right). \quad (9)$$

Учитывая это, первое соотношение теоремы Эренфеста надо переписать в виде

$$\frac{d}{d\tau}<\zeta>=<\frac{3}{2\pi}>-\pi\cdot\left[J(\tau,-\pi)+J(\tau,\pi)\right]. \quad (10)$$

Этот результат, а также для $\frac{d}{d\tau}<V>$ могут быть получены на основе определения квантовых средних, дифференцирования их по времени и учета граничных условий. Используя квантовое уравнение Гамильтона-Якоби, решение уравнения Шредингера для начального тригонометрического пакета исследованы формулы для квантового потенциала Бома, кинетической энергии в окрестности узла волновой функции.

В третьей главе представлены результаты исследования динамики волновых пакетах в ямах с непроницаемыми стенками, когда вводятся дополнительные потенциалы, характеризующие внешние воздействия на электрон. В диссертации рассматриваются, прежде всего, ангармонические потенциалы, пропорциональные кубу или четвертой степени координаты. Затем исследуется динамика волновых пакетов в потенциале с двойной ямой. В первом разделе главы рассматриваются ангармонические потенциалы и обусловленные ими нелинейные возвращающие силы. Из классической механики известно, что период колебаний зависит от энергии и уменьшается с ростом ее. Для квантовой ямы с непроницаемыми стенками и дополнительным внешним воздействием в виде

$$U=\alpha\cdot|\zeta|^3, \quad (11)$$

где α – постоянная, рассматривается движение волнового пакета, который в начальный момент располагался правее центра ямы и имел нулевую начальную скорость. Изучение уровней плотности вероятности как функции координаты и времени показывает сжатие пакета по сравнению с его начальной шириной. После первого отражения пакета от левой стенки ямы происходит вторичное, более сильное сжатие. Затем возникают интерференционные явления, усложняющие картину движения, что ограничивает возможности сжатия для данного потенциала. Другой пример сжимающего потенциала

$$U = a\cdot\left(\zeta+\pi\right)^3,\ \ a=1 \tag{12}$$

характеризуется продолжительным промежутком ускорения, на котором пакет сильно сжимается. Здесь начальный пакет – тригонометрический, смещенный вправо, начальная скорость его равна нулю. В начале пакет двигается справа налево, ускоряясь, вплоть до момента удара о левую непроницаемую стенку; его высота растет, а ширина уменьшается, происходит сжатие. При столкновении с потенциальной стенкой он фрагментируется, причем высота наиболее высокого фрагмента примерно в 5 раз превышает максимальную высоту исходного пакета, число фрагментов равно 4, а ширина всех их намного меньше ширины исходного пакета. Эти свойства подтверждаются на картине уровней для плотности вероятности, а также для зависимости ее от координаты в разные фиксированные моменты времени. Информативными о динамике пакета являются графики для средних значений координаты и скорости как функций времени. На них видны резкие повороты при отражении от стенки. Вертикальные участки описывают скачкообразное изменение скорости при ударе о стенку. Высокая степень локализации плотности вероятности исследовалась при помощи зависимости ее во времени в центре ямы, которая выражается набором высоких пиков в определенные моменты времени; в промежутках между ними плотность вероятности практически равна нулю, т.е. частица практически не может находиться в центре ямы. Топография уровней плотности вероятности показывает, что максимальная высота пакета колеблется во времени, пакет остается в значительной мере сосредоточенным. Для биквадратичного потенциала

$$U=\zeta^4 \tag{13}$$

и смещенного в начальный момент тригонометрического локализованного пакета также наблюдается явление сжатия по истечении определенного времени, начальная высота пакета возрастает в 2 раза. Однако, далее усиливаются неконструктивные интерференционные эффекты, происходит фрагментация. Среднее значение координаты флюктуирует около нулевого значения. Фазовая траектория, выражающая зависимость средней скорости от средней координаты, закручивается и представляет замкнутую кривую с очень малой площадью; при этом средняя скорость изменяется вблизи нуля. Второй раздел главы посвящен квантовому осциллятору с двойной ямой. Исследуется динамика начального волнового пакета

$$\Psi\left(0,\zeta\right)=\begin{cases} 0, & -\pi\le\zeta\le 0; \\ \sqrt{\dfrac{8}{3\pi}}\cdot\sin^2\zeta, & 0\le\zeta\le\pi \end{cases} \tag{14}$$

в квантовой яме с непроницаемыми стенками и потенциалом

$$\tilde{U}=a\left(\zeta^4-\frac{\pi^2}{2}\zeta^2\right),\qquad -\pi\le\zeta\le\pi\,. \tag{15}$$

Здесь параметр a варьируется в пределах от 0.1 до 1. Процесс эволюции для параметров $a = 0.2;\ 0.4$ можно описать следующим образом. В начале пакет осциллирует в правой яме в течение определенного промежутка, совершая определенное конечное число мелкомасштабных периодов осцилляций. Затем происходит туннельный переход в соседнюю, левую яму, где опять в течение определенного промежутка происходит такое же число мелкомасштабных колебаний. Затем путем туннелирования пакет опять попадает в правую яму, и процессы повторяются. Следует выделить два временных масштаба и, соответственно, две частоты. Один из этих масштабов – период осцилляций в яме, другой – промежуток времени с конечным числом мелкомасштабных колебаний и туннельным переходом. Удвоенная величина этого крупного масштаба – период колебаний, обусловленный туннельным переходом. Для малых параметров a ($a = 0.2;\ 0.4$) время самого туннельного перехода, по-видимому, соизмеримо с периодом мелкомасштабных колебаний в яме. Эти результаты основываются на анализе топографии уровней плотности вероятности, функциональной зависимости средней координаты от времени и ее частотного Фурье-спектра. Кроме того, рассчитаны зависимости $N(\tau, \zeta)$ от координаты при разных τ, установлен полупериод времени, когда форма пакета в левой яме симметрична с пакетом в правой яме, т.е. совпадает с ним, если провести совмещение. Для Фурье-спектра средней координаты характерны частоты $\Omega = 0.25$ и $\Omega = 1.125$, первый из них соответствует большой период $T \approx 25$, а второй – малый период $T \approx 0.5$. Это находится в соответствии с характером зависимости средней координаты от времени. С увеличением a продолжительность мелкомасштабных колебаний (т.е. число периодов в яме) возрастает и, соответственно, период крупномасштабного процесса. При $a = 1$ начальный пакет в правой яме колеблется долго, временной период мелкомасштабных осцилляций мал; пакет сосредоточен практически в исходном положении за $\tau \in [0, 25]$. Однако, при этом происходит очень медленное просачивание вероятностной жидкости в левую яму в течение этого же времени. Колебания являются более сложными, чем при $a = 0.2$, $a = 0.4$.

Классический резонанс для пространственно-ограниченного гармонического осциллятора при импульсном воздействии на него обсуждается также в третьей главе. Проблема резонансов гармонического осциллятора в неограниченной системе с эквидистантным энергетическим спектром более или менее изучена. Однако в ограниченной системе с неэквидистантным спектром она не исследовалась. Для исследования классического резонанса, когда частота воздействия совпадает с собственной частотой гармонического осциллятора, была сформулирована следующая задача. Внешнее воздействие моделировалось при помощи сверхкоротких импульсов, расстояние между ними совпадает с периодом собственных колебаний гармонического осциллятора. Начальный пакет был гауссовым, смещенным относительно центра ямы, с нулевой начальной скоростью; в другом варианте расчетов начальный гауссов пакет размещался в центре ямы и имел начальную скорость. При воздействии на волновой пакет сверхкороткими импульсами средние значения координаты и скорости как функции времени возрастали линейно. На плоскости $(<\zeta>, <V>)$ траектория переходила скачкообразно на более высокую "орбиту". Изменяя полярность какого-либо импульса, фазовую траекторию можно вернуть на более низкую "орбиту". На плоскости (τ, ζ) линии уровня для плотности вероятности реагируют на воздействие резонансным образом. Увеличение амплитуды воздействия (высоты импульса) приводит к пропорциональному росту отклика (для средних значений координаты и импульса), что характерно для обычного классического резонанса. Для внешнего воздействия в форме непрерывного во времени гармонического сигнала были исследованы параметрические эффекты: резонансный рост колебаний для средних значений координаты и скорости, а также ослабление колебаний во времени. Эти результаты основаны на анализе реализаций для средних, Фурье-спектров, фазовых траекторий и динамики плотности вероятности. Одна из задач, рассмотренных в главе, однократное импульсное внешнее воздействие на исходный пакет в квантовой яме. Импульсное воздействие характеризуется линейным по координате потенциалом, а начальный пакет является гауссовым или тригонометрическим. Рассматривались режимы движения при длительностях импульса в $\tau_0 = \pi/8, \pi/16$ и силой в 20, 50 (в атомных единицах, связанных с шириной ямы). Динамика исследовалась на основе уровней плотности вероятности в плоскости (τ, ζ), средней координаты $<\zeta>$ и средней скорости $<V>$ как функций времени, а также частотного Фурье-спектра для $<\zeta>$. Зависимость во времени для средних представляет собой пакеты волн, разделенные промежутками, где колебания очень малы. Пакеты содержат конечное число мелкомасштабных колебаний и по форме напоминают биения. Эти реализации характеризуются двумя резко отличающимися масштабами колебаний. Однако, Фурье-спектры содержат значительное число пиков, в том числе частоты, соответствующие этим масштабам.

В главе IV подробно описаны методы численного решения уравнения Шредингера и эквивалентной системы уравнений для вещественной и мнимой частей, в том числе для нестационарного случая. Хотя (в простейшем случае) уравнение Шредингера получается из хорошо известного параболического уравнения теплопроводности формальной заменой коэффициента температуропроводности на комплексный параметр, тем не менее его численное интегрирование представляет собой значительно более сложную вычислительную задачу, т.к. количество аппроксимируемых частных производных после перехода к вещественной и мнимой частям удваивается. В литературе по численным методам уравнению теплопроводности уделяется большое внимание, тогда как уравнение Шредингера обсуждается реже и менее подробно. Наименее разработаны методы решения нестационарного уравнения Шредингера, хотя именно этот случай наиболее важен с точки зрения практического применения. В настоящей диссертации применялись следующие методы численного решения: 1. Разностное моделирование (неявные сетки); 2. Метод прямых. 3. Построение конечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений для амплитуд гармоник. Обсуждаются преимущества и недостатки применения этих методов к решению поставленных задач. Далее описаны применявшиеся в исследовании временных реализаций методы быстрого преобразования Фурье (БПФ, FFT – Fast Fourier Transform) и метод сечений Пуанкаре. Приведен анализ регулярных и хаотических решений на классической и модифицированной моделях Ресслера.

Выводы и результаты

В диссертации проведены обширные исследования динамики волновых пакетов электрона при разных формах силового воздействия на конечном промежутке с непроницаемыми границами (бесконечными стенками).

В частном случае, при отсутствии силового воздействия рассматриваемая квантовая система переходит в бесконечно глубокую потенциальную яму. Как известно, сама по себе бесконечная потенциальная яма для свободного движения пакетов между ее стенками представляет фундаментальную модель квантовой механики и является первым приближением квантовых полупроводниковых ям конечной глубины. Даже в этом, простейшем случае изучение динамики волновых пакетов при заданных начальных условиях все еще представляет собой открытую проблему. В диссертации исследованы эволюция начального узкого гауссова пакета с конечной скоростью и начального широкого тригонометрического пакета с начальной “целой” скоростью (в атомных единицах или связанных с конечной шириною ямы). На основе реализаций для плотности вероятности средних значений динамических переменных и их Фурье-спектров изучены полная и частичная рефокусировки (квантовые возвраты), характерные временные масштабы (мелкий и крупный), предложен дополнительный способ анализа временных масштабов. Вблизи узлов волновой функции обсуждается сингулярное поведение кинетической энергии и квантового потенциала Бома. Точные аналитические решения, записанные в виде суммы ряда, для начального тригонометрического пакета сравнивались с решениями уравнения Шредингера, полученными численно. В анализе для средних значений координаты и скорости контролировалось выполнение теоремы Эренфеста; приведен пример, когда требуется ее обобщение.

В более сложных режимах движения, когда вводится силовое воздействие на конечном промежутке с непроницаемыми границами, возникают новые свойства. Для ангармонических потенциалов, ограниченных стенками ямы, возможен эффект сжатия волнового пакета, обусловленный нелинейным механизмом. Он имеет место не только для степенных потенциалов, но и для гиперболического косинуса. Процессы движения сопровождаются фрагментацией.

Для квадратичного потенциала, ограниченного стенками ямы, т.е. пространственно-ограниченного осциллятора, при импульсных воздействиях на волновой пакет можно реализовать резонанс в эксперименте на основе современных полупроводниковых технологий. Параметрические эффекты, выражающиеся в резонансном росте среднего значения плотности тока или, наоборот, в уменьшении его также могут быть изучены на опыте. Ограничение параметрического резонанса по амплитуде и крупномасштабные модуляционные процессы могут быть обусловлены квантовыми возвратами. Проблема рефокусировок (квантовых возвратов) в системах с распределенным потенциалом на конечном промежутке с непроницаемыми границами требует более крупномасштабных расчетов временных процессов. Для нелинейного осциллятора с двойной ямой, заключенного между двумя непроницаемыми стенками, колебания волновых пакетов связаны с явлением туннелирования. При относительно малой величине потенциального минимума и регулярном режиме колебаний временные, разные по величине, масштабы хорошо выражены. Однако с увеличением потенциального минимума характер процессов усложняется: пакет длительное время находится в одной из ям, однако имеет место непрерывное перетекание вероятностной жидкости в другую яму. Воздействие одиночным кратковременным импульсом на начальный волновой пакет приводит к картине биений для плотности вероятности, а также средних значений координат и скорости. Динамические процессы также характеризуются двумя резко отличающимися временными масштабами. Разработанный программный продукт, изучении неавтономных уравнений Ресслера, визуализация многих расчетов могут быть использованы в последующих исследованиях и для учебных целей.

Цитируемая литература

1. P. Bocchieri and A. Loinger, “Quantum Recurrence Theorem”, Phys. Rev., V. 107, No 2, p. 337-338, (1957).

2. R. N. Hill, “A paradox involving the quantum mechanical Ehrenfest’s theorem”, Am. J. Phys., V. 41(5), p. 736-738, (1973).

Основные результаты исследований опубликованы в работах:

1. Санин А. Л., Багманов А. Т., Ульянова В. Г., Вяххи Е. Н. Физика колебаний отдельного электрона в простых квантовых системах при внешних полевых воздействиях // Труды СПбГПУ. Материалы VII Всероссийской конференции “Фундаментальные исследования в технических университетах”. С.-Петербург, Изд. СПбГПУ. 2003. с. 121-122.

2. Багманов А. Т., Вяххи Е. Н., Санин А. Л., Ульянова В. Г. Концептуальные формулировки квантовой механики и их применение для численного моделирования движения электрона // Материалы VIII Всероссийской конференции “Фундаментальные исследования в технических университетах”. С.-Петербург, Изд. СПбГПУ. 2004. с. 63-64.
3. Санин А. Л., Багманов А. Т., Вяххи Е. Н., Ульянова В. Г. Передача информации при распространении квантового пакета электрона в одномерных системах // Формирование технической политики инновационных наукоемких технологий”. Материалы конф. С.-Петербург, Изд. СПбГПУ. 2004. с. 265-272.
4. Багманов А. Т., Санин А. Л., Многократное отражение квантового пакета непроницаемыми стенками потенциальной ямы // Лазеры. Измерения. Информация. Тез. докл. конф. СПб. 2003. с. 5.
5. A. L. Sanin, A. T. Bagmanov, Vera G. Ulianova. Motion and reconstruction of electron wave packet in simple quantum systems at external field actions // Proceeding of SPAS. SPAS – The St. Petersburg Academy of Sciences on Strength Problems. St. Petersburg, 2003. V. 7 B 31- B 36.
6. A. T. Bagmanov, A. L. Sanin. Quantum evolution of single electron in box with impenetrable walls // Proceed. SPIE. Lasers for Measurements and Information Transfer. V. E. Privalov, Editor. V. 5381. Bellingham, W. A. 2004, p. 1-8.
7. A. L. Sanin, A. T. Bagmanov, Vera G. Ulianova. Oscillations and propagation of quantum packet for electron in box and through background positive charge // proceed. SPIE. Nondestructive Testing and Comp. Simulations in Science and Eng. A. I. Melker, Editor. V. 5400. Bellingham, WA, 2004. p. 7-12.
8. Багманов А. Т., Санин А. Л. Применение теоремы Эренфеста и автокорреляций для анализа квантовых волновых пакетов // Материалы XII Международной научно-методической конференции “Высокие интеллектуальные технологии и генерация знаний в образовании и науке ”, т. 1. СПб, Изд. СПбГПУ. 2005, с. 190-191.
9. A. T. Bagmanov, A. L. Sanin. Oscillatory motion of a quantum packet in a box with impenetrable walls at arbitrary initial velocities // Proceeding of SPAS. SPAS – SPAS – The St. Petersburg Academy of Sciences on Strength Problems. St. Petersburg, 2004. V. 8 A 1-A 9.
10. Багманов А. Т., Санин А. Л. Воздействие сверхкоротких лазерных импульсов на эволюцию квантового пакета электрона в мезоскопической системе // Лазеры. Измерения. Информация. Тез. докл. конф. СПб. 2004. с. 4.

11. A. L. Sanin, A. T. Bagmanov. Shape and Fourier's spectra of quantum packet in a box for electron motion with a specified initial velocity // Proceed. SPIE. Nondestructive Testing and Comp. Simulations in Science and Eng. A. I. Melker, Editor. V. 5831. Bellingham, WA. 2005.
12. A. L. Sanin, A. T. Bagmanov. Generalization of the Ehrenfest theorem to quantum systems with periodical boundary conditions // Proceed. SPIE. Nondestructive Testing and Comp. Simulations in Science and Eng. A. I. Melker, Editor. V. 5831. Bellingham, WA. 2005.
13. Багманов А. Т., Санин А. Л. Классические резонансы при лазерных воздействиях на волновой пакет электрона // Лазеры. Измерения. Информация. Тез. докл. конф. СПб. 2005. с. 1.
14. Санин А. Л., Багманов А. Т. Волновой пакет электрона как носитель информации о движении в квантовых системах // Материалы IX Всероссийской конференции "Фундаментальные исследования в технических университетах". С.-Петербург, Изд. СПбГПУ. 2005.
15. Санин А. Л., Багманов А. Т. Каскады бифуркаций и хаос модифицированной моделиРесслера // Лазеры для медицины, биологии и экологии. Тез. докл. конф. СПб. 2002. с. 45.
16. A. T. Bagmanov, A. L. Sanin. Non-autonomous equations of complicated Rössler's model and bifurcation cascades // Proceed. SPIE. Nondestructive Testing and Comp. Simulations in Science and Eng. A. I. Melker, Editor. V. 5127,.Bellingham, WA. 2003, p. 201-206.

Работа выполнена на кафедре «Высшая математика» Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор
Санин Андрей Леонардович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор
Барыбин Анатолий Андреевич (СПбГЭТУ),
кандидат физико-математических наук, доцент
Горобей Наталья Николаевна (СПбГПУ)

Ведущая организация: Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской Академии наук

Защита состоится 29 июня 2005г. в 16.00 на заседании диссертационного совета Д 212.229.08 ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195 251,
С.-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, II учебный корпус, ауд. 265

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Автореферат разослан «   » мая 2005 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.229.08
кандидат физико-математических наук, доцент Т. В. Воробьева