

Федеральное агентство по образованию  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Национальный проект «Образование»  
Инновационная образовательная программа ННГУ. Образовательно-научный центр  
«Информационно-телекоммуникационные системы: физические основы и  
математическое обеспечение»

А.М. Сатанин

## Динамика электронов в наноструктурах

*Учебно-методические материалы по программе повышения  
квалификации «Новые материалы электроники и оптоэлектроники  
для информационно-телекоммуникационных систем»*

Нижний Новгород

2006

Учебно-методические материалы подготовлены в рамках  
инновационной образовательной программы ННГУ: Образовательно-  
научный центр «Информационно-телекоммуникационные  
системы: физические основы и математическое обеспечение»

Сатанин А.М. Динамика электронов в наноструктурах. Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Новые материалы электроники и оптоэлектроники для информационно-телекоммуникационных систем». Нижний Новгород, 2006, 96 с.

Аннотация. В учебном пособии изложены современные численные методы решения уравнения Шредингера. Дано краткое введение в физику наноструктур и сформулированы основные проблемы, связанные с моделированием электронных состояний. Численные методики излагаются на простых примерах: нахождение спектра методом Бора–Зоммерфельда, решение стационарного уравнения Шредингера методом фазовых функций, решение задачи рассеяния и изучение эволюции квантовых состояний (динамика волновых пакетов). Для решения каждого класса задач разработаны конкретные алгоритмы и предложена их программная реализация в среде *Mathematica*. В конце разделов приведено большое число задач для самостоятельного решения. Обсуждается применение разработанных подходов для моделирования электронных состояний в наноструктурах.

## СОДЕРЖАНИЕ

|  |    |
|--|----|
| <b>ВЕДЕНИЕ</b>   | 5  |
| <b>ГЛАВА 1. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ</b>               | 7  |
| 1.1 Квантование  | 9  |
| 1.2 Эволюция квантовых состояний во времени                              | 10 |
| 1.3 Конструирование квантовых состояний                                  | 11 |
| 1.4 Конструирование внешних полей и наноструктуры                        | 12 |
| 1.5 Резонансы в наноструктурах   | 16 |
| 1.6 Вопросы для самостоятельного изучения                                | 17 |
| <b>ГЛАВА 2. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ КВАНТОВАНИЕ</b>                            | 19 |
| 2.1. Правило квантования Бора–Зоммерфельда. Спектр                       | 20 |
| 2.3. Численная реализация метода квантования Бора–Зоммерфельда           | 22 |
| 2.4. Алгоритм и программа  | 24 |
| 2.5. Вопросы и задания   | 26 |
| <b>ГЛАВА 3. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА: МЕТОД ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ</b> | 28 |
| 3.1. Формулировка краевой задачи   | 28 |
| 3.2. Уравнение для фазовой функция и осцилляционная теорема              | 29 |
| 3.3. Пример: частица в бесконечно глубокой яме                           | 32 |
| 3.4. Волновая функция  | 33 |
| 3.5. Алгоритм  | 34 |
| 3.6. Программа в среде <i>Mathematica</i>                                | 35 |
| 3.7. Вопросы и задания   | 37 |
| <b>ГЛАВА 4. ЗАДАЧА РАССЕЙЯНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ</b>                   | 39 |
| 4.1 Задача рассеяния в одномерном случае                                 | 39 |
| 4.2. S-матрица   | 41 |
| 4.3. Внутренняя задача   | 43 |
| 4.4. Пример аналитического решения внутренней задачи                     | 44 |
| 4.5. Метод численного решения внутренней задачи                          | 45 |

|  |           |
|--|-----------|
| 4.6. Численный алгоритм  | 48        |
| 4.7. Программы в среде <i>Mathematica</i>                            | 48        |
| 4.8. Вопросы и задания   | 52        |
| <b>ГЛАВА 5. КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА</b>                                   | <b>54</b> |
| 5.1. Динамика волновых пакетов на решетке                            | 55        |
| 5.2. Схема Кэли  | 56        |
| 5.3. Алгоритм численного решения динамической задачи                 | 57        |
| 5.4. Численная реализация  | 59        |
| 5.5. Вопросы и задания   | 64        |
| <b>ГЛАВА 6. РЕЗОНАНСЫ БРЕЙТА-ВИГНЕРА И ФАНО В<br/>НАНОСТРУКТУРАХ</b> | <b>66</b> |
| 6.1. Резонансы Брейта-Вигнера  | 68        |
| 6.2. Резонансы в многоканальных системах                             | 69        |
| 6.3. Многоканальное уравнение Шредингера                             | 70        |
| 6.4. Вопросы и задания   | 73        |
| <b>ГЛАВА 7. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ<br/>В НАНОКАНАЛАХ</b>  | <b>74</b> |
| 7.1 Модель электронного наноканала                                   | 74        |
| 7.2 Матрица рассеяния и резонансное приближение                      | 77        |
| 7.3 Интерференция резонансных состояний                              | 87        |
| 7.4 Выводы   | 92        |
| <b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>  | <b>93</b> |
| <b>ЛИТЕРАТУРА</b>  | <b>96</b> |

## ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика была создана в начале прошлого столетия усилиями многих исследователей (М. Планк, Н. Бор, Э. Шредингер, В. Гейзенберг, П. Дирак и многие другие). Если первоначально квантовая механика воспринималась как новая натуральная философия, вызывая многочисленные споры об ее основах и методах, то в XXI столетии она всё в большей мере рассматривается как прикладная наука, позволяющая изучать интересные для приложений эффекты, моделировать физические процессы, рассчитывать новые электронные приборы и т.п.

При изучении квантовой механики особая роль принадлежит задачам, имеющим точное решение, когда решение уравнения Шредингера представляется в виде алгебраических выражений и функций. Вместе с тем известно, что число точно решаемых задач весьма ограничено. Фактически, точное решение можно найти только для систем с высокой симметрией. В этом случае в системе имеется полный набор коммутирующих с гамильтонианом операторов, и такая система является интегрируемой. Для реальных физических систем, и в особенности многочастичных (атомы, молекулы, твердые тела), уравнение Шредингера неинтегрируемо, поэтому для его анализ необходимо привлекать приближенные и численные методы.

Основная цель данного пособия состоит в изложении численных методов решения уравнения Шредингера и методики проведения конкретных расчетов простейших квантово-механических систем. Мы хотим продемонстрировать, что если объединить уравнение Шредингера и компьютерные технологии, то получится хорошо оснащенная лаборатория, в которой любому предоставляются удобные средства постижения природы. При этом моделирование процессов и извлечение следствий может стать вполне доступной и приятной задачей. Как физиков нас будут интересовать не столько рафинированные математические методы, сколько практические рецепты вычислений. Мы хотим продемонстрировать, как на дисплее компьютера увидеть происходящие в квантовом мире процессы. Автор ставит амбициозную цель научить читателя ставить и проводить численные эксперименты в квантовой механике. Осознавая необъятность поставленной цели, мы выбрали для изложения в качестве базовых следующие разделы квантовой механики: метод квантования Бора-Зоммерфельда, спектральная задача, задача рассеяния и квантовая динамика. Методика решения избранных проблем разобрана в данном пособии весьма детально – от идеи до программной реализации. Чтобы

подчеркнуть инженерный характер излагаемых вопросов, мы даем краткое введение в нанофизику, показываем, как готовятся квантовые состояния с помощью физически реализуемых полей, обсуждаем вопрос о создании самих полей. Мы придаем важное значение дополнительным задачам для самостоятельного решения, которые существенно расширяют круг рассматриваемых систем. Такие задачи сопровождают каждый раздел данного пособия.

Основой пособия послужил материал, подготовленный автором для специального курса по вычислительным методам в квантовой механике, который в разное время читался на физическом факультете ННГУ. Некоторые численные алгоритмы я рассказывал студентам и сотрудникам Chonnam National University (Республика Корея) и Ball State University (США). Большую роль в формировании взглядов автора на излагаемые в пособии вопросы и подходы сыграли многочисленные дискуссии с В.Я. Демиховским, Г.М. Максимовой и Д.Е. Бурланковым. Я признателен всем студентам физфака, которые терпеливо прослушали данный курс, составили программы, отладили их на языках разного типа (Pascal, C, Fortran, *Mathematica*) и задавали мне много интересных вопросов. Особо хотел бы поблагодарить студентов А.И. Малышева, О.Н. Рознову, Л.А. Чижову, С.М. Кашина, Н.В. Закревского, Н.Ю. Рябову и других за прямое и косвенное участие в подготовке данного пособия.

# ГЛАВА 1. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

Мы хотим напомнить читателю основные идеи, лежащие в основе квантовой механики. Мы знаем, что имеются кардинальные различия в методах описания физических систем на классическом и квантовом языках. Однако, несмотря на это, можно найти много общего в самих подходах к динамике систем. Поэтому полезно провести параллель, посмотреть, как описываются классические и квантовые системы, как готовятся начальные состояния в том и другом случаях.

В классической механике под временной динамикой частицы во внешних полях понимают ее перемещение в пространстве. Считается, что динамикой частиц управляют уравнения Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \\ \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \end{cases} \quad (1.1)$$

где

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

функция Гамильтона частицы (это есть кинетическая + потенциальная энергии частицы). Отметим, что система уравнений Гамильтона (1.1) полностью эквивалентна уравнению Ньютона  $m \ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V$ . Уравнения (1.1) описывают классическую траекторию частицы. Чтобы ее найти, требуется решить уравнения (1.1) с заданными начальными условиями [1].

Пусть в момент времени  $t = 0$  приготовлено начальное состояние частицы, то есть заданы ее начальная координата  $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0$  и импульс  $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$ . Возникает вопрос, как практически приготовить такое состояние частицы?

Удобно сделать это в два этапа. На первом этапе включим внешнее поле, локализирующее частицу вблизи точки  $\mathbf{r}_0$  (см. рис. 1.1, мы изображаем на рисунках везде одномерную координату  $x_0$ ). Для этого нужно выбрать потенциал, минимум которого как раз имеет координату  $\mathbf{r}_0$ . Ясно, что всегда присутствующая сила трения

(сколь угодно малая), приведет систему в данный минимум, если подождать некоторое время (большее времени релаксации).

Затем мы включим импульсное поле – кратковременную силу, сообщаящую частице начальный импульс  $\vec{p}_0$ . После такой процедуры частица приобретет требуемую координату и импульс. Время, когда такое случится, мы будем называть начальным, полагая  $t = 0$ . Дальнейшая эволюция частицы (изменение ее состояний во времени) происходит согласно уравнениям Гамильтона (1.1).

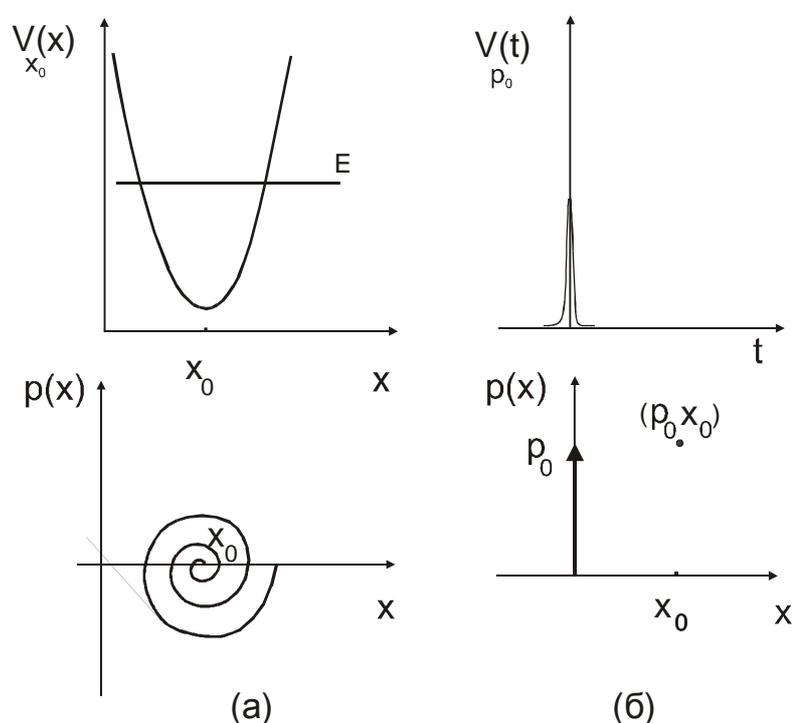


Рис. 1.1. Схема приготовления начальной координаты (а) и начального импульса (б) классической частицы

Таким образом, движение частиц в полях сводится к решению дифференциальных уравнений с начальными условиями. В таком случае говорят, что сформулирована задача Коши или задача с начальными данными. Для решения задачи Коши в настоящее время разработаны эффективные численные методы [2-6], позволяющие проследить эволюцию достаточно сложных физических систем. При этом число рассматриваемых частиц практически ограничено только размерами памяти и быстродействием компьютеров.

Анализируя движение классических частиц в полях, мы можем выделить два типа движений. Первый случай, когда движение частиц не ограничено (инфинитно). В этом случае можно проследить за ними только в течение какого-то большого, но ограниченного промежутка времени. Во втором случае – частицы могут двигаться только в заданной области. Это означает, что их движение ограничено (финитно). Оно, как правило, периодически (квазипериодично), и достаточно рассмотреть движение части за один период. Как было впервые установлено Н. Бором, периодическое движение при квантовании характеризуется дискретным спектром.

### 1.1. Квантование

Как мы знаем из учебников [7], квантовая механика системы строится по такой схеме: имеется классическая система, требуется построить ее квантовый аналог. Такая процедура называется квантованием. Отметим, что не для любых систем может быть указан классический аналог!

Сформулируем основные правила квантовой механики:

- 1) Физической величине (наблюдаемой)  $a$  сопоставляется самосопряженный оператор  $\hat{A}$ . Например, координате сопоставляется оператор координаты; энергии – оператор Гамильтона и т.д.
- 2) Наблюдаемая величина может принимать только те значения  $a_n$ , которые являются собственными значениями оператора соответствующей физической величины:  $\hat{A}u_n = a_n u_n$ . Здесь  $u_n$  – собственная функция,  $a_n$  – собственное значение  $\hat{A}$ .
- 3) Физическая система описывается нормированной волновой функцией  $\Psi$ :  $\int \Psi^* \Psi dV = 1$ . Иными словами, задается состояние системы  $\Psi$ .
- 4) Если физическая система может находиться в состояниях  $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ , то она может находиться и в состоянии с волновой функцией:  $\Psi = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \dots + c_n u_n + \dots$ .
- 5) Вероятность того, что в состоянии  $\Psi$  физическая величина принимает значение  $a_n$ , равна:  $|c_n|^2$ , где  $c_n = \int u_n^* \Psi dV$ .

- б) Эволюция состояний в квантовой механике описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (1.3)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона.

Описание системы по такой схеме и составляет содержание квантовой механики. Волновое уравнение (1.3) играет в квантовой механике ту же роль, что и уравнение Ньютона (или эквивалентно - уравнение Гамильтона (1.1)) – оба отвечают за динамику. В классике мы описываем систему детально, мы следим за ее положением и импульсом в каждый момент времени. В квантовой механике метод более грубый: мы интересуемся, какая у частицы волновая функция, а касательно координат и импульсов можем предсказать только распределение вероятностей.

## 1.2. Эволюция квантовых состояний во времени

Итак, мы принимаем правило, согласно которому частица описывается волновой функцией  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Пусть в начальный момент времени приготовлено начальное состояние  $\Psi(\vec{r}, 0)$ . Волновая функция в произвольный момент времени  $t$  определяется уравнением (1.3). Квантовая механика дает рецепт, согласно которому, зная волновую функцию в момент времени  $t$ :  $\Psi(\vec{r}, t)$ , можно извлечь информацию о системе в любой момент времени. Проблема состоит в том, что в уравнении (1.3) нет как таковых координат и импульсов частиц, а присутствуют только соответствующие операторы. Иными словами, нам необходимо определить временную зависимость набора наблюдаемых величин, характеризующих данную систему, научиться извлекать ее из волновой функции. Кратко суть дела сводится к следующему: мы раскладываем полученную волновую функцию по собственным функциям наблюдаемой и находим коэффициенты разложения, дающие амплитуды обнаружения тех или иных значений наблюдаемой [7].

Если оператор Гамильтона не зависит явно от времени, то волновая функция может быть записана в виде

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt} \Psi(\vec{r}), \quad (1.4)$$

где  $E$  пока произвольная константа, а  $y(\vec{r})$  подчиняется стационарному уравнению Шредингера

$$\hat{H}y = Ey. \quad (1.5)$$

В данном случае задача свелась к отысканию собственной функции и собственных значений оператора Гамильтона. Согласно правилам квантовой механики, константа  $E$  может быть проинтерпретирована как энергия частицы. Задача по отысканию разрешенных значений энергии и соответствующих волновых функций называется *спектральной*.

### 1.3. Конструирование квантовых состояний

Обсудим теперь, как приготовить начальное состояние частицы в квантовой механике. Волновую функцию в начальный момент времени запишем в виде

$$y(x,0) = A(x) \exp\left(i \frac{S(x)}{\hbar}\right), \quad (1.6)$$

где  $A(x)$  и  $S(x)$  пока произвольные действительные функции. Как и в классической механике, разобьем процесс приготовления состояния на две стадии (рис. 1.2). На первом этапе нужно поместим частицу в поле  $V_A(x)$ , такое, что волновая функция основного состояния в этом поле как раз и есть  $A(x)$ . В процессе релаксации частица окажется в основном состоянии, и ее волновая функция будет равна  $A(x)$ . Легко найти соответствующий потенциал. Можно считать, что уравнение Шредингера при  $t < 0$  имеет вид:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_A(x)\right)A(x) = E_A A(x). \quad (1.7)$$

Тогда потенциал равен:

$$V_A(x) = E_A - \frac{1}{A(x)} \frac{\hat{p}^2}{2m} A(x). \quad (1.8)$$

Конечно, он определен с точностью до константы, но это не имеет значения в квантовой механике.

На втором этапе достаточно подействовать на частицу коротким импульсом

$$V_s(x, t) = -S(x)d(t). \quad (1.9)$$

В результате у волновой функции появляется требуемая фаза  $S(x)$  (см. рис. 1.2).

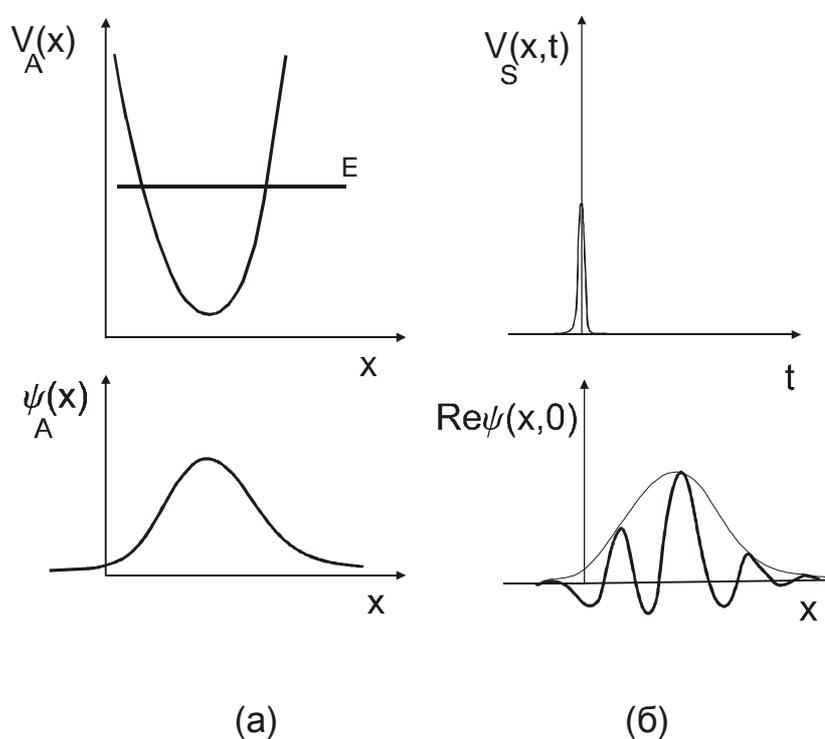


Рис. 1.2. Приготовление квантового состояния. На первой стадии: (а) формирование амплитуды; на второй (б) – фазы волны

#### 1.4. Конструирование внешних полей и наноструктуры

Рассмотрим сначала качественные особенности движения частиц во внешних полях. Если частица массы  $m$  с энергией частицы  $E$ , то можно сказать, что она обладает характерной длиной волны  $l \sim \sqrt{E/m\hbar^2}$  (дебройлевская длина волны). Если движение происходит в области, имеющей характерный размер  $L$ , то движение будет носить квазиклассический характер при условии  $l \ll L$ . В случае, когда

$l \sim L$ , необходимо последовательное квантово-механическое описание частицы в таком поле.

На заре квантовой механики люди имели дело только с атомными системами. В конце прошлого века полупроводниковая технология достигла такого уровня, что стало возможным изготавливать структуры, у которых размеры сравнимы с характерной дебройлевской длиной волны электронов. Попробуем понять, почему такое стало возможным и что мы можем «заказать» у технологов, изготавливающих системы с ультрамалыми размерами.

Чтобы понять, почему удается приготовить «квантовую» систему, необходимо посмотреть, как описывается движение электронов (и дырок) в полупроводниках вблизи краев зон (а именно такие возбуждения играют главную роль в электронном транспорте и отвечают за оптические свойства) [8,9]. Для наших целей важно понять, что если энергия электрона лежит вблизи краев зон, то длина волны электрона много больше постоянной решетки, и электронная волна распространяется как в непрерывной среде. Полупроводник эквивалентен эффективной среде и мы можем ввести некоторые эффективные параметры такой среды, например, эффективную массу  $m^*$  электрона (отличающуюся от массы электрона в вакууме), диэлектрическую проницаемость и т.п., характеризующие свойства электрона. Технология позволяет менять состав материалов и, тем самым, параметры частиц. Проиллюстрируем сказанное на примере популярного материала с переменным составом:  $Ga_{1-x}Al_xAs$  (здесь  $x$  доля алюминия в арсениде галлия, которая легко меняется при приготовлении структур методами молекулярно-лучевой эпитаксии). Если взять «чистый»  $GaAs$ , то гамильтониан для электронов можно записать в виде

$$H(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V_{GaAs}, \quad (1.10)$$

где  $m^* = 0.067m$  эффективная масса электрона ( $m$  - масса электрона в вакууме),  $V_{GaAs}$  - край электронной зоны проводимости (отсчитываемый от потолка валентной зоны).

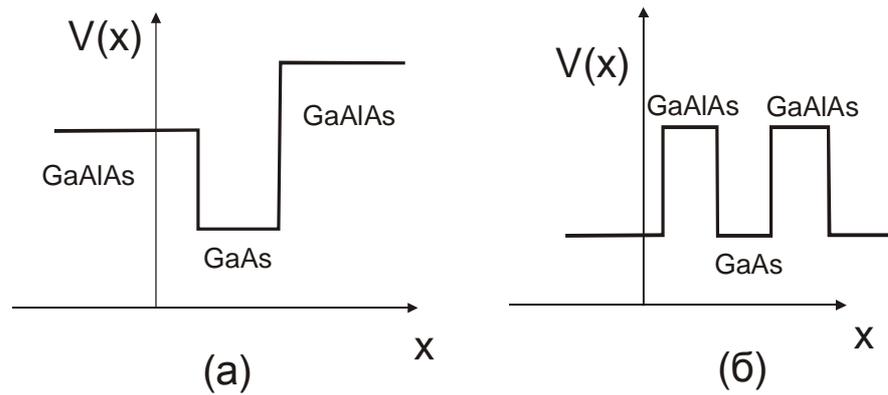


Рис. 1.3. Схематически представлен пример гетероструктур с заданным профилем: (а) – квантовая яма (слева и справа от ямы в слоях разное содержание  $Al$ ); (б) – двухбарьерная структура

Если теперь в слой полупроводника ввести алюминий, то эффективная масса и граница зоны изменятся. Наиболее существенный эффект связан зависимостью  $V_{Ga_{1-x}Al_xAs}$  от состава. Отметим, что  $V_{Ga_{1-x}Al_xAs}$  играет роль потенциала, действующего на частицу. Например, при  $x = 1$  сдвиг границы  $V_{Ga_{1-x}Al_xAs} - V_{GaAs}$  зоны составляет несколько электрон вольт. Варьируя состав, мы можем изменять потенциальный рельеф. Именно этот эффект используется на практике для создания потенциальных ям, барьеров и т.д. (см. рис. 1.3 и 1.4). Можно утверждать следующее: если мы хотим спроектировать состояние типа (1.6), то мы должны заказать потенциал типа (1.8). Нестационарный потенциал типа (1.9) можно создавать, воздействуя на полупроводник кратковременным (например, фемтосекундным) импульсом.

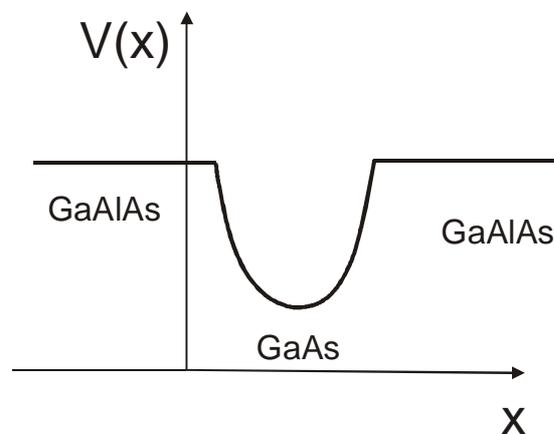


Рис. 1.4. Пример гетероструктур с параболическим профилем (достигается плавным изменением послойного содержания  $Al$ )

В настоящее время разработаны и другие методы получения систем с заданным профилем потенциала для «запирания» (конфаймента) электронов. Например, весьма популярен метод, основанный на формировании управляющих (металлических) электродов на поверхности гетерослоя, под которым расположена квантовая яма (см. рис. 1.5) . Если подать на металлические электроды отрицательный потенциал, то можно «выдавить» электроны из области непосредственно под электродами. Движение в доступных двумерных областях описывается уравнением Шредингера с потенциалом, определяемым формой электродов. Практически таким способом создаются весьма сложные потенциальные профили: квантовые точки (квантовые «острова»), квантовые каналы, сверхрешетки и т.д.

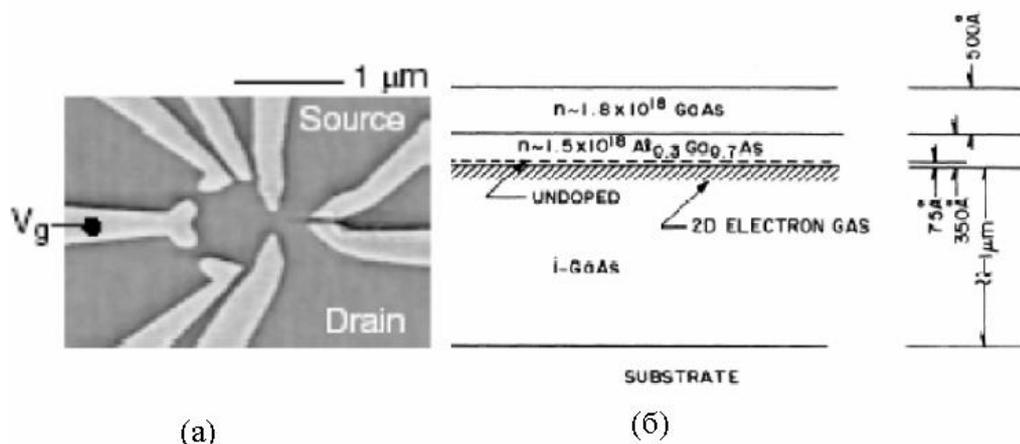


Рис. 1.5. Представлены: (а) «квантовый остров» (согласно А.С. Johnson et al., Phys. Rev. Lett. Vol. 93, p. 106803 (2004)) – область в двумерном газе, сформированная металлическими электродами; (б) вертикальный разрез структуры, над которой помещены управляющие электроды

Повышенный интерес вызывают исследования электронного транспорта в двумерном электронном газе. Потенциально на основе двумерных каналов возможно создание так называемых "латеральных" квантово-интерференционных приборов. Недавно было продемонстрировано, что в двумерных электронных каналах имеет место квантование проводимости. Присутствие примесей может приводить к квантовой эрозии ступеней проводимости и ряду новых квантово-когерентных эффектов.

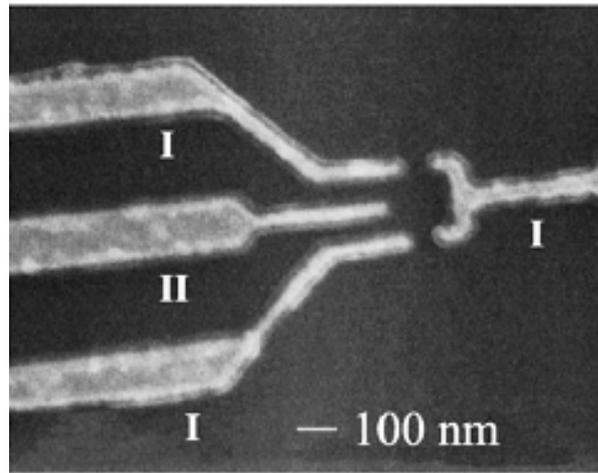


Рис. 1.6. Электронная микрофотография одноэлектронного транзистора (G'ores J. et al., Phys. Rev. B. 2000. V62. P. 2188)

### 1.5. Резонансы в наноструктурах

Резонансные туннельные явления привлекают внимание, начиная со времен возникновения квантовой теории. Первоначально резонансные состояния были изучены в атомных и ядерных системах. В физике твердого тела интерес к таким явлениям возник в связи с созданием класса гетероструктур. Чтобы получить резонансный уровень, необходимо иметь по крайней мере два тонких барьера, разделенных узкозонным полупроводниковым слоем. Возникающие вследствие конструктивной интерференции волн между барьерами квазисвязанные состояния приближенно характеризуются двумя параметрами: положением резонанса и его шириной. Ширина резонанса определяется частотой колебания электрона между барьерами и вероятностью туннелирования через барьеры. При этом ширина уровня всегда конечна, поскольку имеется конечная вероятность ухода электрона из ямы. Резонансы такого типа называются резонансами Брейта-Вигнера (в теории ядра) или резонансами Фабри-Перо (в оптических явлениях).

При изучении туннелирования в гетероструктурах с многодолинным спектром носителей было показано, что здесь возможны интересные интерференционные явления, приводящие к возникновению необычной резонансной структуры прозрачности. Интерференция состояний в барьере означает эффективное взаимодействие резонансов Фано и Брейта-Вигнера.

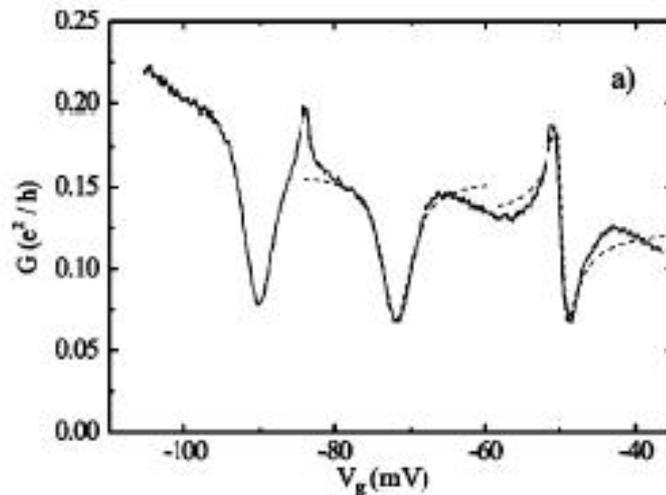


Рис. 1.7. Сравнительное поведение кондактанса в режиме Фано (Gores J. et al., Phys. Rev. B. 2000. V62. P. 2188)

Взаимодействием резонансов и, следовательно, прозрачностью и туннельным током можно управлять, меняя параметры системы: ширину барьера, молярную концентрацию  $Al$ , давление, напряженность электрического поля и т.д.. Поскольку туннельный ток выражается интегрально через прозрачность барьера, а форма резонансов Фано существенно меняется в электрическом поле, необходимо выяснить, какой вклад дают резонансы в вольт-амперную характеристику. Мы вернемся к детальному обсуждению резонансов в последующих разделах.

### 1.6. Вопросы для самостоятельного изучения

1. Рассмотреть движение частицы в одномерном потенциале. Полагая, что имеется сила трения, нарисовать фазовую траектории частицы (в плоскости  $(x, p)$ ). Показать, что на «последней» стадии, когда энергия частицы близка к минимуму потенциала, последний можно аппроксимировать параболой. Получить точное выражение для фазовой траектории.
2. Пусть частица покоилась до момента времени  $t = 0$ . Найти значение импульса частицы при  $t = 0 +$ , если был включен потенциал:  $V(t) = -V_0 t d(t)$ .
3. Решая уравнение Шредингера, получить фазу волновой функции в момент времени  $t = 0 +$ , возникающую под действием возмущения (1.9).

4. Пусть частица помещена в параболический потенциал. Изучить релаксацию энергии частицы под действием внешнего воздействия. Указание: в качестве внешней системы взять цепочку осцилляторов, линейно связанных с частицей.
5. Рассмотреть движение частицы в бесконечно-глубокой яме шириной  $a$ . Пусть начальное состояние выбрано в виде  $\psi(x,0) = bx(a-x)$ . Используя разложение по стационарным функциям, найти временную зависимость волновой функции от времени. Обсудить измерение координаты, импульса и энергии частицы в произвольный момент времени в данном состоянии.
6. Написать программу в среде *Mathematica*, позволяющую строить потенциалы типа изображенных на рис. 1.3 и 1.4.

## ГЛАВА 2. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ КВАНТОВАНИЕ

Напомним основные предположения, лежащие в основе квазиклассического приближения. Если движение частицы происходит в области, имеющей характерный размер  $L$ , движение будет носить квазиклассический характер при условии, когда дебройлевская длины волн частицы  $l \ll L$ . Пусть частица движется в одномерном поле  $V(x)$ . Уравнение Шредингера в этом случае имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}y'' + V(x)y = Ey. \quad (2.1)$$

Волновую функцию частицы ищем в виде

$$y(x) = Ae^{i\frac{S(x)}{\hbar}}. \quad (2.2)$$

Считаем, что укороченное действие  $S$  таково, что  $S \gg \hbar$ . В этом случае при подстановке (2.2) в уравнение Шредингера (2.1), можно получить ряд по степеням  $\hbar$ , первые члены которого сводятся к

$$\begin{cases} \frac{1}{2m} \left( \frac{dS}{dx} \right)^2 + U(x) = 0, \\ \frac{d}{dx} \left( A^2 \frac{1}{m} \frac{dS}{dx} \right) = 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Решая уравнения (2.3), получим:  $S = \pm \int p(x)dx$ ,  $A(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}}$ , где

$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$  - классический импульс частицы. Волновая функция принимает вид:

$$y(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{i\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x')dx'} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x')dx'} \quad (2.4)$$

Решение (2.4) справедливо, если

$$\left| \frac{dD}{dx} \right| \ll 1, \quad (2.5)$$

где  $\mathbf{D} = \mathbf{h} / p(x)$  - дебройлевская длина волны, т.е. длина волны частицы должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой.

## 2.1. Правило квантования Бора–Зоммерфельда. Спектр

Рассмотрим потенциальную яму, в которой возможно движение по замкнутой траектории (см. рис. 2.1). Пусть частица имеет энергию  $E$ , а её движение ограничено точками поворота  $a$  и  $b$ , которые зависят от энергии.

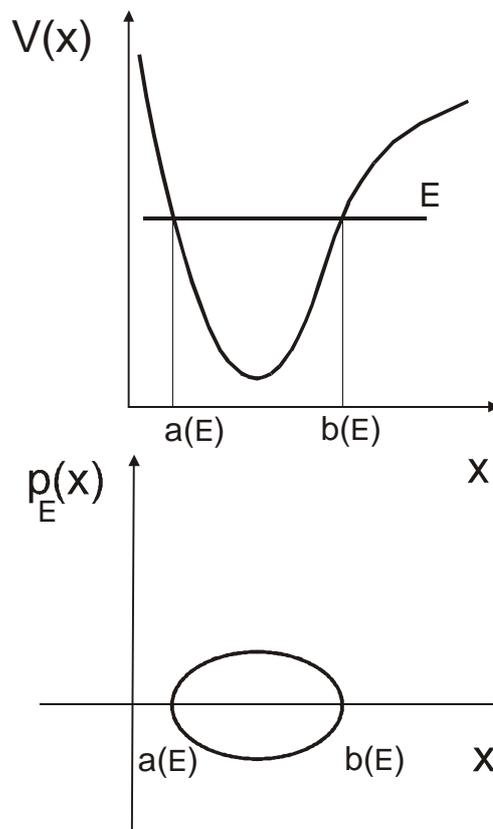


Рис. 2.1. Область финитного движения частицы в потенциальной яме (в классически доступной области)

Волновая функцию справа от точки поворота  $a$  записывается в соответствие с (2.4); ее необходимо «сшить» с функцией в классически недоступной области согласно [7]. В результате она приобретает вид

$$y(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left( \frac{1}{\mathbf{h}} \int_a^x p(x) dx + \frac{p}{2} g \right), \quad (2.6)$$

где параметр  $g$  учитывает поведение потенциала вблизи точки поворота (см. ниже).

Слева от  $b$  функция пишется как

$$y(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx + \frac{p}{2} g \right). \quad (2.7)$$

Условие совпадений (2.6) и (2.7) в классически разрешенной области приводит к

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = p(n + g). \quad (2.8)$$

Уравнение (2.8) выражает приближенное условие квантования (правило квантования Бора–Зоммерфельда). Оно позволяет определять стационарные состояния частицы в квазиклассическом случае. Целое число  $n$  равно числу нулей волновой функции, то есть оно определяет номер стационарного состояния и, тем самым число узлов собственной функции. Ясно, что состояния дискретного спектра квазиклассичны при больших значениях  $n$ . Расстояние между соседними узлами совпадает по порядку величины с дебройлевской длиной волны, а при больших  $n$  это расстояние мало по сравнению с размерами области движения.

Отметим, что выбор параметра  $g$  зависит от типа точки поворота. Это связано с тем, что около точки поворота квазиклассическое приближение неприменимо. Необходимо рассмотреть поведение функции, обращаясь к уравнению Шредингера, чтобы установить значение константы  $g$  [7]. Если в точках поворота потенциал обращается в бесконечность (стенки «жесткие»), то  $g=1$ ;  $g=3/4$ , если одна из стенок жесткая, и  $g=1/2$ , если обе стенки «мягкие». (см. [7]).

Условие квантования (2.8) можно записать в виде:

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar(n + g). \quad (2.9)$$

Левая часть выражения (2.9) – это площадь, охватываемая замкнутой классической фазовой траекторией частицы. Таким образом, уравнение (2.9) представляет собой закон квантования площади в фазовом пространстве (см. рис. 2.2).

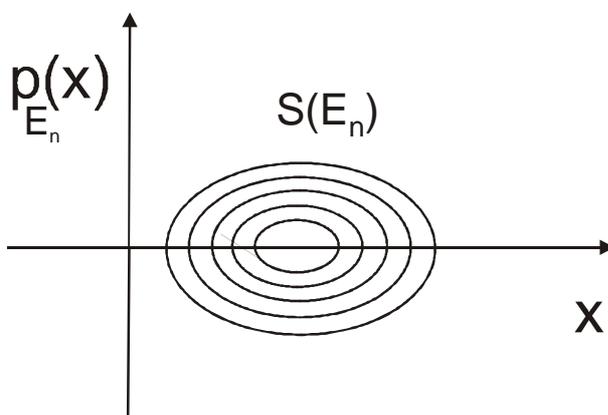


Рис. 2.2. Дискретные площади в фазовом пространстве, «заметаемые» траекторией частицы с энергией  $E_n$

## 2.2. Численная реализация метода квантования Бора–Зоммерфельда

Если выполнено условие квазиклассичности, то приближенные значения энергий стационарных состояний (спектр), могут быть получены из уравнения (2.8). Однако в явном виде спектр удастся найти аналитически только для ограниченного числа потенциалов. Численные методы позволяют получить спектр для широкого класса потенциалов.

Прежде всего, необходимо перейти к безразмерным переменным, в качестве которых следует выбрать естественные единицам измерения, характерные для данной задачи. В уравнении (2.8) совершим формальное преобразование:

$$\bar{x} = x / x_0, \quad \bar{E} = E / E_0, \quad \bar{p} = p / p_0.$$

Тогда уравнение примет вид:  $p_0 x_0 \oint \bar{p}(\bar{x}) d\bar{x} = 2\pi \hbar (n + g)$ , а соотношение между импульсом и энергией:

$$E_0 \bar{E} = \frac{p_0^2}{m} \frac{\bar{p}^2}{2} + U(\bar{x}).$$

Для фиксации свободных параметров  $x_0$ ,  $p_0$  и  $E_0$ , можно поступить различными способами. Например, в качестве единицы измерения длины можно взять характерный размер области классического движения частицы, а другие параметры определить следующим образом:  $p_0 = \mathbf{h} / x_0$ ,  $E_0 = \frac{\mathbf{h}^2}{mx_0^2}$ , при этом  $\bar{U}(\bar{x}) = U(\bar{x}) / E_0$ , тогда уравнение (2.8) в безразмерных единицах примет вид:

$$2 \int_{\bar{a}(E)}^{\bar{b}(E)} \bar{p}(\bar{x}) d\bar{x} = 2p(n+g), \text{ где } \bar{p} = \sqrt{2(\bar{E} - \bar{U}(\bar{x}))}. \quad (2.10)$$

Ниже черточки над всеми величинами могут быть опущены, при этом предполагается, что все переменные выбраны безразмерными.

Координаты точек поворота зависят от энергии и определяются из уравнения:

$$E = U(a) = U(b). \quad (2.11)$$

Отметим, что значения энергий частицы неизвестны и их нам предстоит определить. Для этого мы определим интервал  $E_{\min} < E < E_{\max}$ , в котором следует искать спектр. Введем обозначение:

$$S(E) = \int_{a(E)}^{b(E)} p(x) dx. \quad (2.12)$$

Рассмотрим спектральную функцию:

$$f_n(E) = S(E) - p(n+g). \quad (2.13)$$

Семейство функций  $f_n(E)$  для разных  $n$  качественно изображено на рис. 2.3.

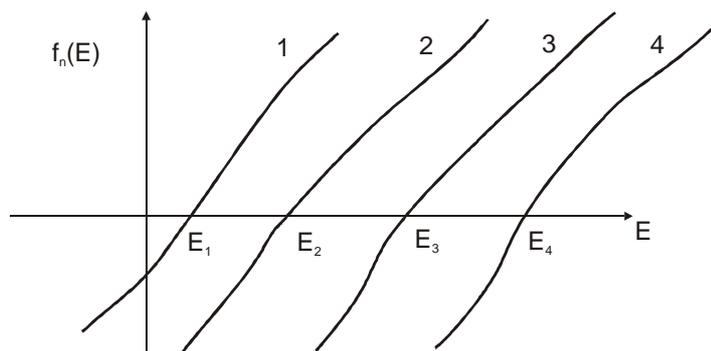


Рис. 2.3. Схема нулей спектральной функции  $f_n(E)$ : ее нули дают энергетические уровни частицы

Для отыскания нулей  $f_n(E)$  можно применять различные методы: метод дихотомии, метод Ньютона и т.д. В результате применения выбранной процедуры мы получим набор чисел  $E_n$ ; чтобы получить энергии в обычных единицах, необходимо умножить полученные значения на величину  $E_0$ .

### 2.3. Алгоритм и программа

Отыскание спектра в рамках метода Бора–Зоммерфельда может быть выполнено по схеме:

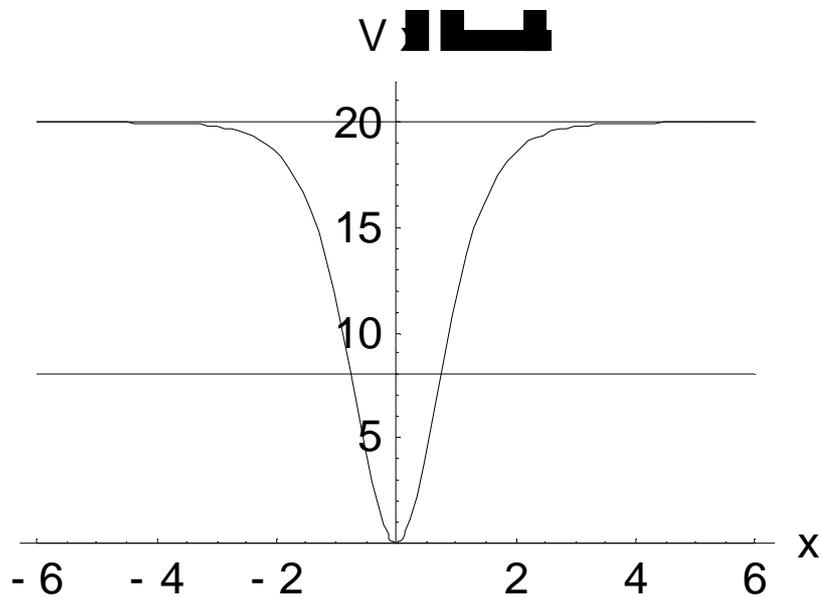
1. Задаем потенциал  $V(x)$ .
2. Задаем диапазон поиска энергий:  $(E_{\min}, E_{\max})$
3. Изображаем на графике выбранный потенциал и фиксируем диапазон поиска энергий.
4. Для заданной энергии согласно (2.11) находим точки поворота и вычисляем  $S(E)$  по формуле (2.12).
5. Для фиксированного  $n$  находим нули спектральной функции  $f_n(E) = S(E) - p(n + g)$  - уровень энергии.
6. Меняя  $n$ , повторяем поиск других уровней в данном интервале.
7. Выводим на экран номера состояний и соответствующие им энергии, изображаем на графике уровни энергии, изображаем фазовые траектории.

Для нахождения квазиклассических уровней энергии предназначена программа в пакете *Mathematica*.

```

(* Выводим потенциал *)
V[x_] := V0 - V0/(1 + Exp[-2 x]);
V0 = 20;
(* Диапазон энергий, в котором ищутся уровни; задание области движения *)
Ebegin = 0.; Eend = 8;
xmin = -6.; xmax = 6.;
PlotV = Plot[V[x], {x, xmin, xmax}, PlotRange -> {2, 22},
  Label -> "V",
  DefaultFont -> {"Helvetica", 18}
];

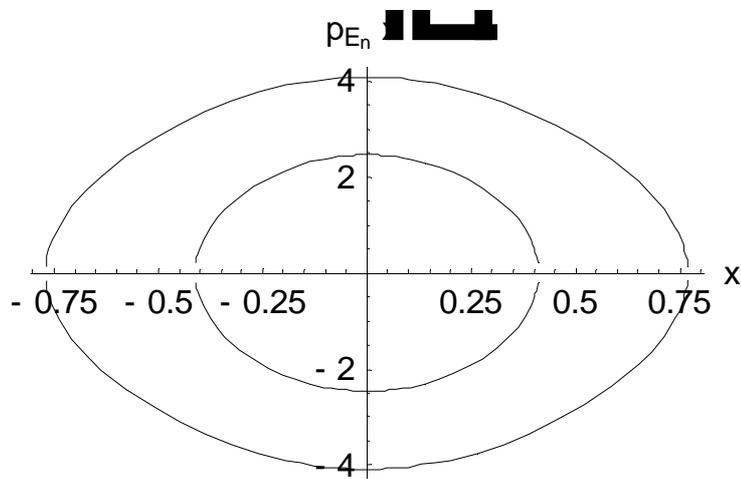
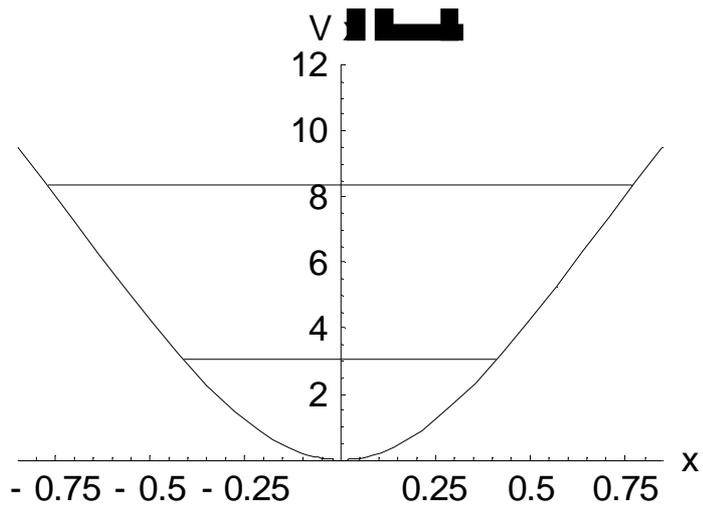
```



Результат работы программы

Результат работы программы

- n -  $E_n$
- 1 - 3.03772
- 2 - 8.36227



#### 2.4. Вопросы и задания

1. Получить (2.8) непосредственно решая уравнение Шредингера (2.1) с учетом определенного поведения потенциала вблизи точек поворота (стенки «жесткие»; одна из стенок «жесткая», а другая – «мягкая»; обе стенки «мягкие»).
2. Считая выполненными условия квазиклассичности, аналитически (если возможно) и численно найти разрешенные значения энергии частицы в потенциальных полях:

а)  $V(x) = I|x|^{2n}$ , для любого заданного  $n > 1$ ; б)  $V(x) = -\frac{V_0}{ch^2(x/a)}$  ;

в)  $V(x) = -\frac{I}{|x|^{2n}}$ , для любого заданного  $n > 1$ ; г)  $V(x) = V_0 \left( \frac{x}{a} - \frac{a}{x} \right)^2$ .

3. Получить условие квантования Бора–Зоммерфельда для электрона, движущегося в однородном магнитном поле.
4. Рассмотреть движение электрона в магнитном поле вблизи поверхности полупроводника (считать работу выхода бесконечно большой).
5. Найти уровни энергии электрона в инверсионном слое, моделируя потенциал выражением:

$$V(x) = \begin{cases} ax, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Решение задачи можно получить точно, выразив волновую функцию через функцию Эйри (см. [7]), и приближенно, используя метод квантования Бора–Зоммерфельда. Выполнить численный анализ и сравнить результат с аналитическим.

## ГЛАВА 3. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА: МЕТОД ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ

В настоящее время развито большое число методов решения стационарного уравнения Шредингера (спектральной задачи): «метод стрельбы», метод Уилкинсона (метод анализа знаков детерминантов), метод конечных элементов и т.д. Простейшим является метод фазовых функций, который тесно связан с методом стрельбы, но основывается непосредственно на осцилляционной теореме. Суть метода заключается в переходе от дифференциального уравнения второго порядка для волновой функции к уравнению первого порядка для фазы волновой функции.

### 3.1. Формулировка краевой задачи

Рассмотрим движение частицы в потенциальном поле  $V(x)$ . Гамильтониан частицы записывается в виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (3.1)$$

а волновая функция  $y(x)$  подчиняется уравнению

$$Hy(x) = Ey(x) \quad (3.2)$$

и условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y(x)|^2 dx = 1. \quad (3.3)$$

Поместим частицу в большой «ящик» с непроницаемыми стенками. Размер ящика  $L$  выбирается так, чтобы стенки не сказывались на движении частицы (см. рис. 3.1). Для этого левая и правая стенки отодвигаются так, чтобы волновая функция вблизи них была исчезающе мала. Если малость воздействия стенок обеспечена, то мы можем наложить на функцию граничные условия:

$$y(0) = 0, \quad y(L) = 0. \quad (3.4)$$

Таким образом, уравнение Шредингера

$$y''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))y(x) = 0 \quad (3.5)$$

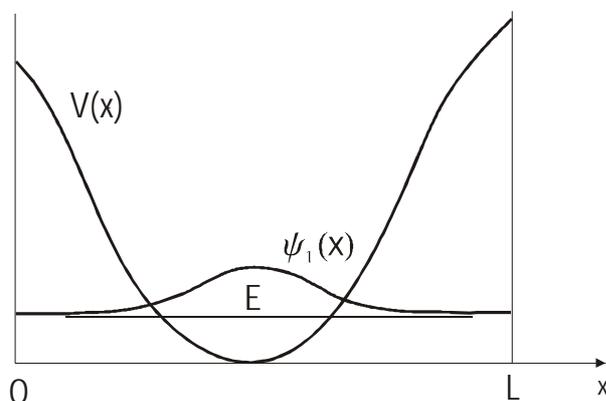


Рис. 3.1. Изображены: потенциальное поле (в котором движется частица), вспомогательный «ящик» и волновая функция низшего уровня

необходимо решить в области  $(0 < x < L)$ , удовлетворив граничным условиям (3.4) в точках  $x = 0$  и  $x = L$ . Как мы уже подчеркивали ранее, мы имеем дело с краевой задачей, когда условия заданы на разных концах области определения функции. Такая задача вызывает затруднение при решении ее на компьютере. Идея решения сводится к тому, чтобы свести ее каким либо образом к задаче Коши, которая легко алгоритмируется.

### 3.2. Уравнение для фазовой функции и осцилляционная теорема

Будем полагать, что можно сдвинуть начало отсчета энергии так, чтобы минимум энергии совпадал с началом отсчета энергии. Введём следующие обозначения

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $u(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2}$ . Уравнение Шредингера (3.5) переписывается в виде

$$y'' + (k^2 - u(x))y = 0. \quad (3.6)$$

Фазу волны  $q(x)$  введем соотношением

$$\frac{y'}{y} = k \cdot \operatorname{ctg} q . \quad (3.7)$$

Дифференцируя еще раз соотношение (3.7) и используя уравнение (3.6), мы можем исключить вторую производную от волновой функции. Приведем выкладки:

а) дифференцирование (3.7) дает

$$\frac{y''}{y} - \left( \frac{y'}{y} \right)^2 = k \left( -\frac{q'}{\sin^2 q} \right); \quad (3.8)$$

б) из уравнения Шредингера (3.6) имеем:

$$\frac{y''}{y} = u(x) - k^2 ; \quad (3.9)$$

г) подстановка (3.9) и (3.7) в (3.8) дает

$$u(x) - k^2 - k^2 \operatorname{ctg}^2 q = -k \frac{q'}{\sin^2 q} \quad (3.10)$$

или

$$(u(x) - k^2) \sin^2 q - k^2 \cos^2 q = -k q' . \quad (3.11)$$

Упрощая (3.11), получаем уравнение для фазы в виде:

$$q' = k - \frac{u(x)}{k} \sin^2 q . \quad (3.12)$$

Что происходит с фазой в точках  $x = 0$  и  $x = L$ ? Чтобы выяснить это, перепишем (3.7) в виде:

$$\frac{y}{y'} = \frac{1}{k} \cdot \operatorname{tg} q . \quad (3.13)$$

Исходя из граничного условия (3.4) при  $x = 0$  нужно положить фазовую функцию

$$q(0) = 0, \quad (3.14)$$

а при  $x = L$

$$q(L) = pn. \quad (3.15)$$

Таким образом, мы получили уравнение первого порядка для фазы волновой функции, которое вытекает непосредственно из уравнения Шредингера.

Из уравнения (3.12) при учете соотношений (3.14) и (3.15) непосредственно следует так называемая *осцилляционная теорема*. Мы видим, что нам надо найти траектории, которые начинаются  $q(0) = 0$  и должны попасть в точки  $q(L) = pn$ . Пока мы не знаем самих траекторий, но мы знаем, что одна такая траектория имеется для каждого  $n$ , и, тем самым, для каждой энергии  $E_n$ . Посмотрим, что произойдет, когда какая-то траектория перечёт линию  $q(L) = pn$  (см. рис. 3.2). Из уравнения (3.12) непосредственно следует, что в этом случае

$$q' = k > 0. \quad (3.16)$$

Отсюда можно заключить: каждая траектория пересекает линию  $q(L) = pn$  только один раз. На рис. 3.2 изображено семейство траекторий, которые могут пересекать  $q(L) = pn$  с положительным наклоном. Тогда из (3.13) следует однозначная связь между числом узлов волновой функции и номером уровня.

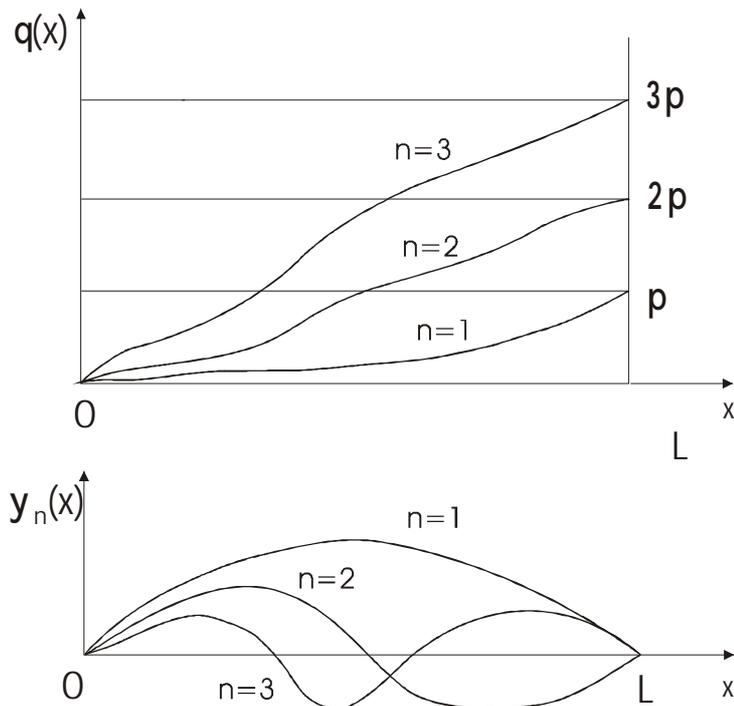


Рис. 3.2. Фазовая функция (сверху) и волновая функция (снизу) частицы. Производная фазовой функции положительна на линиях  $pn$ , а пересечение ее с линиями  $pn$  дает нули волновой функции

### 3.3. Пример: частица в бесконечно глубокой яме

Рассмотрим потенциальную яму с бесконечными стенками, для которой потенциал задаётся функцией вида

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \\ \infty, & x > L, \quad x < 0. \end{cases} \quad (3.17)$$

При  $u = 0$  решением уравнения (3.12) является фазовая функция

$$q = kx + q_0. \quad (3.18)$$

Необходимо теперь удовлетворить граничным условиям (3.14) и (3.15), откуда получим коэффициенты  $k$  и  $q_0$ :  $q_0 = 0$ ,  $k_n = \frac{pn}{L}$ , а, следовательно, энергия

частицы  $E_n = \frac{\mathbf{h}^2 p^2 n^2}{2mL^2}$ . Состояния  $n = 0$  нет, т.к. это состояние запрещено

соотношением неопределенности. Число осцилляций волновой функции определяется фазой:

$$y_n(x) = A \sin q_n(x), \quad q_n(x) = k_n x. \quad (3.19)$$

Нормированная волновая дается хорошо известным выражением

$$y_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{p_n}{L} x. \quad (3.20)$$

### 3.4. Волновая функция

Допустим, мы нашли фазу и разрешенные значения энергии частицы. Как найти теперь волновую функцию? Можно обратиться к уравнению (3.7), однако интегрирование нелинейного уравнения требует выбора очень малого шага, поскольку волновая функция экспоненциально растет в запрещенной области. В этом случае рекомендуется использовать итерационные методы. Если не требуется высокая точность, то можно поступить проще. Возьмем дискретное уравнение Шредингера

$$\begin{aligned} y_{l+1} + y_{l-1} + u_l y_l &= 0, \\ u_l &= -2 + \frac{2m}{\hbar^2} \Delta x^2 (E - V_l), \end{aligned} \quad (3.21)$$

где  $\Delta x$  - шаг сетки. Чтобы найти волновую функцию уровня с номером  $n$ , мы можем подставить  $E = E_n$  и выбрать в качестве «начальных» условий для волновой функции  $\tilde{y}_0 = 0$  и  $\tilde{y}_1 = 1$ . Далее находя последовательно  $\tilde{y}_l$  во в остальных узлах, мы получим ненормированную волновую функцию. Нормированная функция определяется выражением:

$$y_l = \frac{\tilde{y}_l}{\sqrt{\sum_i |\tilde{y}_i|^2}}. \quad (3.22)$$

Итак, решая уравнение для фазовой функции, мы находим спектр, а по заданным значениям энергии – соответствующие волновые функции. Тем самым, спектральная задача решена.

### 3.5. Алгоритм

Теперь мы можем сформулировать схему расчета уровней и волновых функций. Рассмотрим потенциальную яму. Погрузим систему в ящик с бесконечными стенками. Далее:

1) Записываем уравнение для фазовой функции с соответствующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} q' &= k - \frac{u(x)}{k} \sin^2 q, \\ q(0, E) &= 0, \\ q(L, E) &= pn. \end{aligned} \tag{3.23}$$

2) Задаем интервал поиска  $(E_{\min}, E_{\max})$ .

3) Разбиваем интервал энергий на  $\Delta E \ll |E_n - E_{n-1}|$ , тогда  $N = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{\Delta E}$ .

4) Стартуем с  $E_{\min}$ . Решаем уравнение для фазы с  $k(E_{\min})$ . Если фаза меньше  $p$ :  $|q(L, E_{\min}) - p| < d$ , то добавляем шаг и т.д. ( $d$  –точность определения фазы).

Автоматически контролируем шаг.

5)  $n = 2$ . Стартуем с  $E_1 + \Delta E$  и т.д.

6) Волновую функцию можно построить, если известны энергии  $E_1, E_2, \dots, E_n$

согласно  $y_{l+1} + y_{l-1} + u_l y_l = 0$ , с  $u_l = -2 + \frac{2m}{\hbar^2} \Delta x^2 (E - V_l)$ .

Замечание:

Для практического нахождения фазовой функции рекомендуется применять метод Рунге-Кутты 4-го порядка. Нам надо решить:

$$\begin{aligned} q' &= f(q), \\ q(0) &= 0. \end{aligned}$$

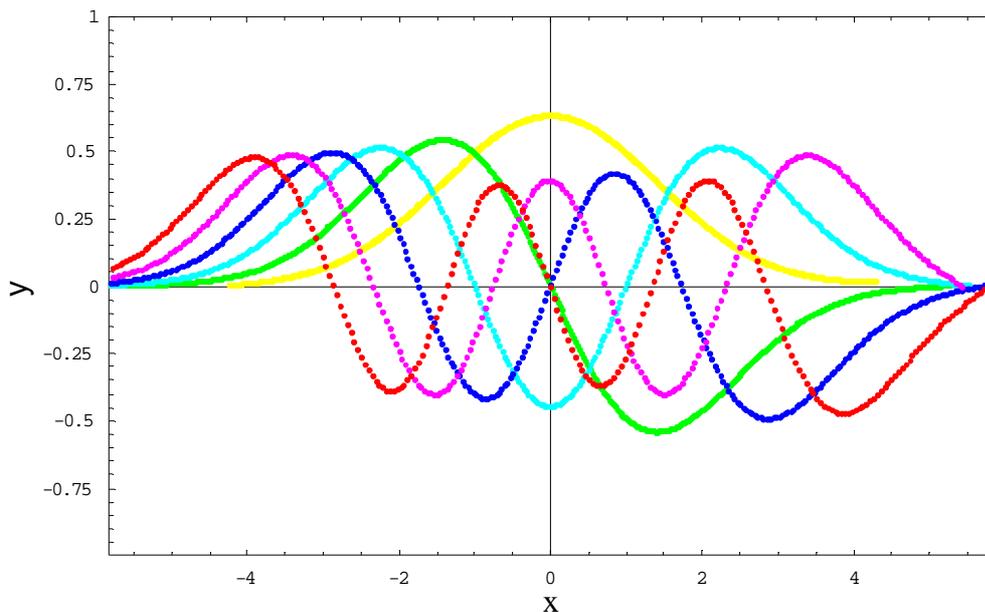


```

In[90]:= dE= 0.01; * Точность определения энергии *
npx= 200;
ex= 0.01;
N = Fundament; Emin
On скане...
Modulab x...
While...
If Funca > 0, a0 = a, b0 = a...
While...
If Funca < 0, b0 = b...
ModulForq x...
q = 0; xj = ...
While...
p1 = dx* f...
p2 = dx* f...
p3 = dx* f...
p4 = dx* f...
q = q + 1/6 * (p1 + p2 + 2*p3 - 4*p4) = xj + dx
a0 = xmin; b0 = xmax; While...
If Funca = 0, a0 = x0, b0 = x0
En = ...
Print "n - En"
Modulab...
Modul...
Do...
If AppendTo...
Print...
qa = 0;
Do...
While...
AppendTo...
IF...
Print...
Emin
граф...
Do...
Axes@ True, Frame@ True...
Print...
DisplayFunction@ Identity...
Show graph...

```

- n - En
- 0 - 0.495
- 1 - 1.495
- 2 - 2.495
- 3 - 3.495
- 4 - 4.505
- 5 - 5.505



### 3.7. Вопросы и задания

1. Обобщить метод фазовых функций на случай, когда частица может находиться в «подбарьерной» области. Указание: модифицировать граничные условия (3.4) на случай стенок конечной высоты.

2. Используя метод фазовых функций, найти спектр электрона в полях а)

3.  $V(x) = Ix^4$ ; б)  $V(x) = -\frac{V_0}{ch^2(x/a)}$  ; в)  $V(x) = A(e^{-2ax} - 2e^{-ax})$ ;

$$V(x) = V_0 \left( \frac{x}{a} - \frac{a}{x} \right)^2.$$

4. Методом фазовых функций найти спектр в поле:

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{a}{x}, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

5. Найти уровни энергии электрона в инверсионном слое, моделируя потенциал выражением:

$$V(x) = \begin{cases} ax, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Сравнить с точным решением.

6. Разработать метод численного решения уравнения Шредингера в импульсном представлении.

## ГЛАВА 4. ЗАДАЧА РАССЕЙЯНИЯ В КАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В экспериментах по рассеянию частицы, испущенные источниками, налетают на мишень, а затем, после взаимодействия с мишенью, детектируются приборами, расположенными на больших расстояниях от рассеивателя. Для описания процессов рассеяния необходимо решить уравнение Шредингера с соответствующими граничными условиями. В данном разделе мы обсудим, как внешняя задача может быть сведена к внутренней краевой задаче с комплексными граничными условиями. Мы разовьем численный метод решения этой задачи.

### 4.1. Задача рассеяния в одномерном случае

Рассмотрим свободную частицу, движущуюся в одном измерении. Ее гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (4.1)$$

Оператор импульса  $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$  коммутирует с  $\hat{H}_0$ , и потому эти операторы имеют общую базисную функцию. Их собственными функциями будут плоские волны

$$y(x) = A^{\pm} e^{\pm ipx/\hbar}. \quad (4.2)$$

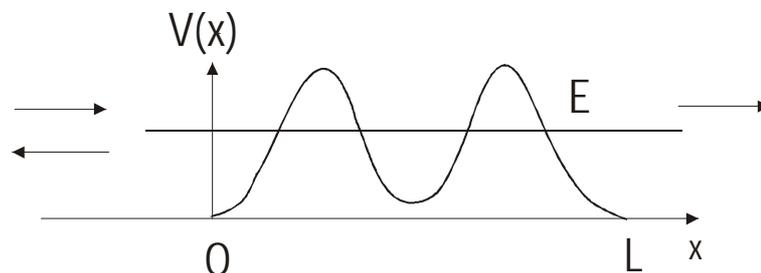


Рис. 4.1. Рассеяние волн на одномерном потенциале: слева имеется источник частиц и отраженные частицы, справа – только прошедшие частицы

Таким образом, состояния рассеяния характеризуются импульсом и его знаком; будем называть такие состояния каналами рассеяния. Пусть теперь на частицу действует потенциал  $V(x)$ . Предположим, что  $V(x)$  отличен от нуля в области порядка  $L$  и что  $V(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$  (как это изображено на рис. 4.1). Волновая функция подчиняется уравнению

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.3)$$

Удобно переписать (4.3) в виде

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi = 0. \quad (4.4)$$

Решение, соответствующее источникам, находящимся при  $x \rightarrow -\infty$  (слева от рассеивателя), записывается в виде

$$\psi(x) = A_l^+ e^{ikx} + A_l^- e^{-ikx}, \quad (4.5)$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  волновой вектор,  $E > 0$ . Как видно, решение (4.5) есть суперпозиция двух частных решений, соответствующих падающим и отраженным волнам. Совершенно аналогично, при  $x \rightarrow +\infty$  (справа от рассеивателя) имеем

$$\psi(x) = A_r^+ e^{ikx} + A_r^- e^{-ikx}. \quad (4.6)$$

Однако, если источник частиц расположен слева, то при  $x \rightarrow +\infty$  есть только уходящая волна ( $A_r^- = 0$ ), поэтому

$$\psi(x) = A_r^+ e^{ikx}. \quad (4.7)$$

Падающие и рассеянные волны можно характеризовать потоками вероятностей. Введем потоки падающих  $j_0$ , отраженных  $j_R$  и прошедших  $j_T$  частиц. Используя квантово-

механическое выражение для потока вероятностей [7], потоки слева и справа от рассеивателя записываются как:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_l^+|^2, \quad j_R = \frac{\hbar k}{m} |A_l^-|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k}{m} |A_r^+|^2. \quad (4.8)$$

Счетчик частиц позволяет определять относительные величины, которые можно характеризовать коэффициентами прохождения

$$T(E) = \frac{j_T}{j_0} = \frac{|A_r^+|^2}{|A_l^+|^2} \quad (4.9)$$

и отражения

$$R(E) = \frac{j_R}{j_0} = \frac{|A_l^-|^2}{|A_l^+|^2}. \quad (4.10)$$

Подобные соотношения нетрудно получить и для случая, когда источник частиц находится справа от рассеивателя.

## 4.2. S-матрица

Процессы столкновения частиц удобно описывать S- матрицей, которая содержит всю информацию о свойствах рассеивателя [10]. Прежде всего, мы дадим элементарное введение в теорию S - матрицы. Затем мы обсудим, как можно вычислять элементы S - матрицы, а также какую информацию можно извлечь из матрицы рассеяния.

Как видно из (4.9) и (4.10), для вычисления наблюдаемых величин нужно знать только отношения амплитуд. С другой стороны, поскольку уравнение Шредингера линейно, должна существовать линейная связь между амплитудами волн, которую удобно записать в виде

$$\begin{pmatrix} A_r^+ \\ A_l^- \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_l^- \\ A_l^+ \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

где введена матрица  $S$ , связывающая амплитуды падающих и уходящих волн. Из (4.11) следует, что элементами  $S$ -матрицы являются амплитудные коэффициенты отражения  $r$ ,  $r'$  и прохождения  $t$ ,  $t'$ . Из общих соображений (из сохранения потока вероятностей и симметрии относительно обращения времени) следует [10]:

$$S^+ = S^{-1}, \quad S = S^T. \quad (4.12)$$

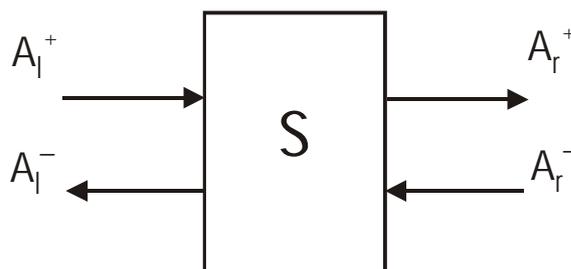


Рис. 4.2. Схема рассеяния.  $S$ -матрица – это «черный ящик», который содержит всю информацию о внутренних процессах в системе

Амплитудные коэффициенты отражения и прохождения, рассматриваемые как функции энергии  $E$ , содержат богатую информацию о системе. Во-первых, амплитуды  $t$  и  $r$  определяют коэффициенты прохождения и отражения

$$T(E) = |t|^2, \quad R(E) = |r|^2. \quad (4.13)$$

Во-вторых, полюсы амплитуд в комплексной плоскости  $E$  соответствуют дискретным уровням или резонансам [10].

Особый интерес при изучении рассеяния частиц вызывают резонансы. Как известно, в случае, когда туннелирующий через высокий барьер электрон имеет энергию, меньшую, чем величина потенциала, вероятность прохождения электрона мала. При этом она монотонно зависит от энергии. Однако, величина прозрачности может сильно возрасти или даже стать полной, если внутри барьера имеются квазисвязанные состояния [10]. В этом случае возможна конструктивная интерференция волновой функции падающего электрона с волновой функцией квазисвязанного состояния и, как следствие, появляется резонанс в прозрачности.

Вблизи резонанса прозрачность как функция энергии имеет форму лоренциана, характеризующегося двумя параметрами: энергией квазисвязанного состояния и шириной резонанса  $\Gamma$ . Квазисвязанное состояние имеет общую природу с истинно связанным состоянием в потенциальном поле [10], поскольку на временах меньше чем  $\sim \hbar/\Gamma$  волновая функция частицы в барьере подобна локализованному состоянию. Очевидно также, что если в потенциальном поле имеется много квазисвязанных состояний, то им будет соответствовать серия резонансов в прозрачности барьера. При изменении параметров барьера виртуальные уровни отталкиваются; соответственно расталкиваются резонансы. Иными словами, происходит рассеяние резонансов, вполне аналогичное рассеянию частиц. Моделирование резонансного рассеяния в квантовой механике представляет особый интерес.

### 4.3. Внутренняя задача

Пусть потенциал  $V(x)$  отличен от нуля в области пространства  $0 < x < L$ . Исходя из соображений предыдущего раздела, решение при  $x < 0$  пишем в виде (для удобства мы переопределим амплитудные коэффициенты):

$$y(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}. \quad (4.14)$$

При  $x > L$  уходящую волну удобно записать как

$$y(x) = te^{ik(x-L)}. \quad (4.15)$$

Волновая функция во внутренней области получается путем решения (4.4). Будем полагать потенциал произвольным и попытаемся разработать алгоритм численного решения (4.4) с соответствующими граничными условиями. Для этого сформулируем внутреннюю задачу, т.е. выразим характеристики рассеяния (в данном случае  $r$  и  $t$ ) через волновую функцию  $y(x)$ , заданную во внутренней области:  $0 < x < L$ . Условия сшивания волновой функции и производной при  $x = 0$  дают:

$$\begin{cases} y(0) = 1 + r, \\ y'(0) = ik(1 - r). \end{cases} \quad (4.16)$$

Исключая  $r$  из уравнений (4.16), получим:

$$y'(0) +iky(0) = 2ik . \quad (4.17)$$

Аналогичные выражения пишутся для волновой функции и её производной при  $x = L$  :

$$\begin{cases} y(L) = t, \\ y'(L) =ikt, \end{cases} \quad (4.18)$$

и мы получаем

$$y'(L) -iky(L) = 0 . \quad (4.19)$$

Итак, во внутренней области ( $0 < x < L$ ) необходимо решить уравнение (4.4) с условиями (4.17) и (4.19). Если внутренняя задача решена, то из (4.16) и (4.18) можно найти

$$r = -1 + y(0) , \quad t = y(L) . \quad (4.20)$$

#### 4.4. Пример аналитического решения внутренней задачи

Решим изложенным выше методом задачу рассеяния частицы в поле (данная задача в дальнейшем будет служить «тестом» программы):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -V_0, & 0 < x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases} \quad (4.21)$$

Во внутренней области необходимо решить уравнение

$$y'' + q^2y = 0 , \quad (4.22)$$

где  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$ . Решение (4.22) записывается как

$$y(x) = ae^{iqx} + be^{-iqx} . \quad (4.23)$$

Постоянные  $a$  и  $b$  находятся из граничных условий (4.17) и (4.19):

$$\begin{cases} (a-b) + k(a+b) = 2k, \\ (ae^{iq} - be^{-iq}) - k(ae^{iq} + be^{-iq}) = 0, \end{cases} \quad (4.24)$$

где  $k = k/q, q = qL$ . Определив  $a$  и  $b$ , мы получим, например, для амплитуды прохождения:

$$t = \frac{4k}{(1+k)^2 e^{-iq} - (1-k)^2 e^{iq}}. \quad (4.25)$$

Используя выражение (4.25), можно построить график зависимости коэффициента прохождения  $T(E)$  от энергии:

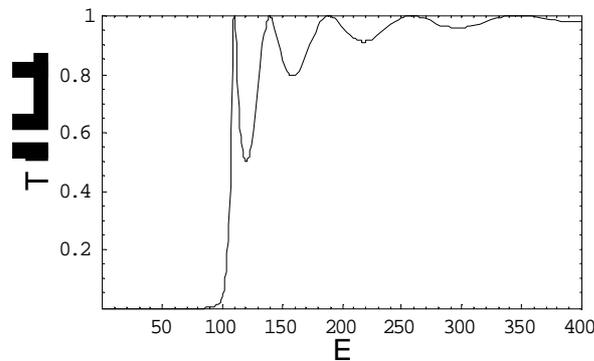


Рис. 4.3. Зависимость прозрачности от энергии частицы при туннелировании через прямоугольный барьер. В качестве единицы энергии используется  $E_0 = \hbar^2 / 2mL^2$  ( $L$  - ширина барьера), при этом высота барьера равна:  $V = 100E_0$

В данной задаче резонансы обусловлены конструктивной интерференцией волн, возникающих при отражении от краев барьера (см. [7,10]). Удобно привлечь аналогию с оптикой и схему Фабри-Перо, интерпретировать резонансную картину прозрачности.

#### 4.5. Метод численного решения внутренней задачи

Таким образом, для произвольного потенциала нам осталось понять, как численно найти элементы матрицы рассеяния. Запишем уравнение Шредингера для волновой функции  $y_n \equiv y(x_n)$  ( $n = 0, 1, \dots, N-1, N$ , заданной на дискретном множестве точек  $x_n = n\Delta$  (узлах сетки, рис. 4.4.) [2-6]:

$$y_{n+1} + y_{n-1} + u_n y_n = 0, \quad (4.26)$$

где

$$u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2}(E - V_n), \quad V_n \equiv V(x_n). \quad (4.27)$$

Очевидно, что такая аппроксимация будет справедлива, если шаг сетки  $\Delta$  мал по сравнению с масштабом изменения волновой функции.

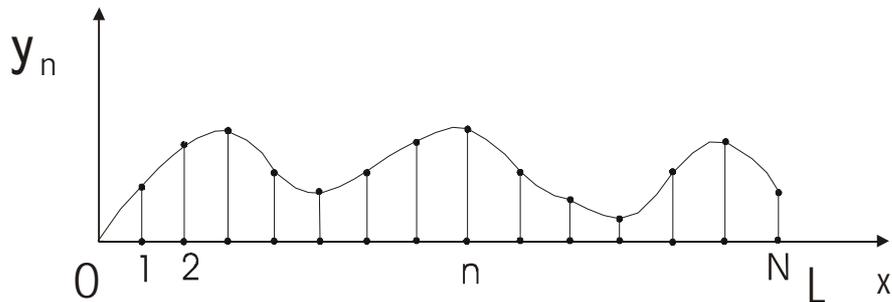


Рис. 4.4. Волновая функция на дискретной решетке во внутренней области

Граничные условия следует записать с учетом того, что теперь мы имеем дело с дискретной решеткой и надо заново вывести соотношения (4.17) и (4.19) исходя из (4.26). Поступая как в разделе 4.4, нетрудно получить [5]

$$y_1 + \left( \frac{u_0}{2} + ik\Delta \right) y_0 = 2ik\Delta, \quad (4.28)$$

$$y_{N-1} + \left( \frac{u_N}{2} + ik\Delta \right) y_N = 0. \quad (4.29)$$

Решение (4.26) ищем в виде

$$y_{n+1} = R_n y_n. \quad (4.30)$$

Подставим в (4.28), и сопоставив с (4.30), получим рекуррентное соотношение для вспомогательных функций  $R_n$ :

$$R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}. \quad (4.31)$$

Граничное условие для  $R_n$  следует записать на правой границе, поскольку в этом случае оно будет однородным и независимым от волновой функции. Для вывода подставим  $y_N = R_{N-1}y_{N-1}$  в (4.29):

$$y_{N-1} + \left( \frac{u_N}{2} + ik\Delta \right) R_{N-1} y_{N-1} = 0. \quad (4.32)$$

Ввиду произвола  $y_{N-1}$ , равенство (4.32) имеет место, если

$$R_{N-1} = - \frac{1}{\frac{u_N}{2} + ik\Delta}. \quad (4.33)$$

Теперь можно стартовать с  $R_{N-1}$ , которое определяется (4.33), и, двигаясь в обратном направлении ( $N-2, \mathbf{K}, 1, 0$ ), найти все вспомогательные функции:  $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$ . Зная  $R_0$ , мы сможем получить начальное условие для волновой функции. Действительно, подставив  $y_1 = R_0 y_0$  в (4.28), получим

$$R_0 y_0 + \left( \frac{u_0}{2} + ik\Delta \right) y_0 = 2ik\Delta,$$

т.е.

$$y_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + \left( \frac{u_0}{2} + ik\Delta \right)}. \quad (4.34)$$

Таким образом, стартуя с (4.34) и используя рекуррентное уравнение для волновой функции (4.30), мы найдем волновую функцию во всех внутренних узлах сетки:  $y_1, y_2, \dots, y_N$ . Амплитудные коэффициенты отражения и прохождения находятся согласно

$$r = -1 + y_0, \quad t = y_N. \quad (4.35)$$

Отметим, что для отыскания оставшихся элементов  $S$ -матрицы следует переформулировать задачу, располагая источник рассеяния справа от мишени.

#### 4.6. Численный алгоритм

На основе результатов предыдущего раздела сформулируем алгоритм численного расчета, который может быть реализован на любом языке программирования:

- 1) Задаем энергию туннелирующего электрона  $E$ ;
- 2) Вычисляем  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$  и  $u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2}(E - V_n)$ ;
- 3) Вычисляем  $R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + ik\Delta}$ ;
- 4) Из рекуррентной формулы  $R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}$  находим  $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$ ;
- 5) Вычисляем  $y_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)}$ ;
- 6) Из рекуррентного соотношения  $y_{n+1} = R_n y_n$  находим  $y_1, y_2, \dots, y_N$ ;
- 7) Определяем  $r = -1 + y_0$ ,  $t = y_N$ ;
- 8) Вычисляем  $T(E) = |t|^2$ ,  $R(E) = |r|^2$ ;
- 9) Изменяем энергию, переходим к 2.

Замечание: предварительно необходимо переписать все выражения, входящие в 1-9, в безразмерных переменных.

#### 4.7. Программы в среде *Mathematica*

Первый фрагмент программы строит график потенциального поля (график не приводится). Пользователь может вставить сюда свой потенциал.

```

(* Барьер *)
V[x_]:=If[(x>=0)&&(x<=1),100,0];
Plot[V[x],{x,-.5,1.5},
  Axes False,
  Frame True,
  PlotRange {{-1,2},{0,150}},
  FrameLabel {FontForm["x"],{"Helvetica",12}],FontForm["V(x)","Helvetica",12]}
];

```

Далее в виде модуля оформлена программа, реализующая описанный в разделе 4.6 алгоритм. В качестве теста используется задача о прямоугольном барьере.

Ниже приведена программа, реализующая анимацию сканирования по энергии. Для этого расчет прозрачности и волновой функции ведется согласно изложенному алгоритму для каждой заданной энергии, что составляет отдельный «кадр».

```

T e := e;
Nm := 1;
k := e;
D := 1;
u n := 1;
Prepend["k", Nm];
Prepend["k", Nm];
R Nm = 1;
i = Nm;
While [i > 0];
Print["u i"];
y 0;
D y;
Tt := 1;
Return Tt;
Nmax = 100;
emin := 0; emax := 100;
Plot[Tt, {Nm, 1, Nmax}, {emin, emax}, 1];
Frame@True, PlotRange@{emin, emax}, 1];
Frame@True,
FrameLabel@{"Nm", "Tt"}, 14];
FontForm["Helvetica", 14];
Epi@>Graphics;
FontForm["Helvetica", 14];
Background@Automatic;

```

■ Wave function \* **HLE**  
 $V_m := 0$   
 $V_x := \frac{V_m}{2} \cdot \sin(\frac{\pi}{2} \cdot x)$

Wave equation module  
 $e := e$ ;  $Nl := 20$ ;  $Nl := 25$ ;  $Nr := 5$

$k := \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$   
 $w := \frac{2 \cdot \pi}{T}$   
 Do  $i = 1$  to  $Nl$  /  $Nl - Nr$   
 Do  $j = 1$  to  $Nr$   
 $u_{i,j} := \sin(k \cdot x_i) \cdot \cos(w \cdot t_j)$   
 Proceed  $i$  away  $Nl$   
 Proceed  $j$  away  $Nr$

$R_{Nl} := \frac{u_{Nl,Nr}}{u_{1,1}}$ ;

$i = Nl$ ;  
 While  $i > 0$  /  $i = 1$   
 $y_0 := \frac{R_{Nl}}{2} \cdot \sin(k \cdot x_i)$   
 Do  $y = 1$  to  $Nl$  /  $1.0$  /  $y_0$

$Do$   $y = 1$  to  $Nl$  /  $1.0$  /  $y_0$   
 $Do$   $x = 1$  to  $Nl$  /  $1.0$  /  $x_0$   
 $ww = \text{Table}[Wave[0, * i], 1, 100]$

$ww = \text{Table}[Wave[0, * i], 1, 100]$

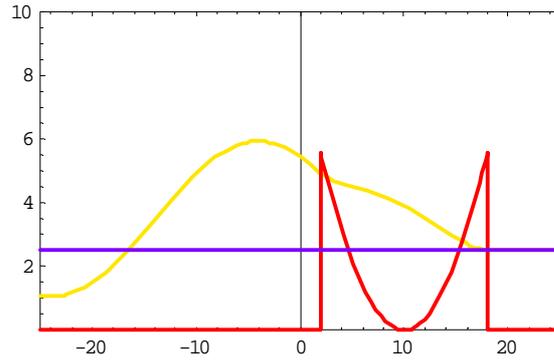


Рис. 4.5. Моделирование процесса туннелирования частицы через «кусоч» параболического барьера. При запуске программы красным цветом изображается потенциал, желтым- квадрат модуля волновой функции, синим – текущее значение энергии

#### 4.8. Вопросы и задания

1. Исходя из закона сохранения потока вероятностей доказать соотношение унитарности:  $S^+ = S^{-1}$  (см. [7,10]).
2. Используя тот факт, что уравнение Шредингера инвариантно относительно обращения времени, доказать соотношение:  $S = S^T$  (см. [10]).
3. Переписать соотношения:  $S = S^T$ ,  $SS^+ = I$  через амплитудные коэффициенты прохождения и отражения (см. [7]) и получить:  $R(E) + T(E) = 1$ .
4. Получить коэффициенты прохождения и отражения методом раздела 4.5 для прямоугольной ямы и прямоугольного барьера.
5. Вычислить коэффициент прохождения для треугольного барьера

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ ax, & 0 < x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

(Решение во внутренней области выразить через функции Эйри (см. [7])). Построить графики зависимостей коэффициентов прохождения и отражения от энергии.

6. Исходя из формулы Фабри-Перо найти положения резонансов в случае прямоугольно барьера.
7. Пусть на дискретной решетке потенциал отличен от нуля только в одном узле:  $V_0 = a$  и равен нулю на остальных узлах. Решая дискретное уравнение Шредингера, найти коэффициенты прохождения и отражения (см. [11]).
8. Исследовать положение полюсов амплитуды прохождения, полученной в задаче 7 (см. [10]).
9. Исходя из дискретного уравнения Шредингера, получить соотношения (4.28) и (4.29) (см. [5]).
10. Продемонстрировать рассеяние частицы в полях:

10.1. 
$$V(x) = \begin{cases} a(x - L/2)^2, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$
 Изучить резонансы в прозрачности.

10.2. 
$$V(x) = \begin{cases} -\frac{a}{ch^2(x - L/2)}, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

11. Обобщить полученный алгоритм на случай, когда потенциал имеет различные асимптотики, например:  $V(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$ , но  $V(x \rightarrow +\infty) \rightarrow V_r = const$  (см. [7,10]).

## ГЛАВА 5. КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА

Мы будем интересоваться эволюцией квантовой системы во времени. Следуя Дираку, удобно ввести абстрактную запись вектора состояний:  $|\mathbf{y}(t)\rangle$  (не связанную с выбором базиса). Если мы захотим знать волновую функцию в координатном представлении, то нам нужно будет только рассмотреть проекции  $|\mathbf{y}(t)\rangle$  на собственные вектора оператора координаты  $|\mathbf{r}\rangle$ :  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{y}(t) \rangle = \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t)$ . Пусть задан вектор начального состояния системы:  $|\mathbf{y}(0)\rangle$  (см. Раздел 1). Эволюция вектора состояния описывается уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{y}(t)\rangle = \hat{H} |\mathbf{y}(t)\rangle. \quad (5.1)$$

Волновую функцию можно искать в виде:

$$|\mathbf{y}(t)\rangle = \hat{U}(t) |\mathbf{y}(0)\rangle, \quad (5.2)$$

где введен оператор эволюции

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}\right). \quad (5.3)$$

Действительно, в начальный момент времени имеем:  $\mathcal{U}(0) = \mathcal{E}$  ( $\mathcal{E}$ - единичный оператор) и

$$|\mathbf{y}(t=0)\rangle = \mathcal{E} |\mathbf{y}(0)\rangle = |\mathbf{y}(0)\rangle, \quad (5.4)$$

а в произвольный момент времени получаем:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{y}(t)\rangle = i\hbar \left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right) \mathcal{U}(t) |\mathbf{y}(0)\rangle = \hat{H} \mathcal{U}(t) |\mathbf{y}(0)\rangle = \hat{H} |\mathbf{y}(t)\rangle. \quad (5.5)$$

Таким образом, (5.2) доставляет формальное решение временного уравнения Шредингера.

### 5.1. Динамика волновых пакетов на решетке

Разобьем временную ось (отрезок  $(0, t)$ ) на  $N$  маленьких интервалов длительностью  $\Delta t = t/N$ :



Рис. 5.1. «Дискретная» временная ось: волновая функция задана в узлах решетки

Тогда оператор эволюции можно представить в виде:

$$U(t) = \exp\left(-i \frac{H \Delta t N}{\hbar}\right) = \left(\exp\left(-i \frac{H \Delta t}{\hbar}\right)\right)^N = \underbrace{U(\Delta t) U(\Delta t) \dots U(\Delta t)}_N. \quad (5.6)$$

Соотношение означает, что мы можем реализовать эволюцию за большой промежуток времени как последовательность шагов эволюции за малые отрезки времени. Из (5.2) и (5.6) также следует, что если мы уже «дошли» до какого-то момента времени  $t$ , то следующий шаг можно выполнить как

$$|y(t + \Delta t)\rangle = U(\Delta t)|y(t)\rangle. \quad (5.7)$$

Соотношение (5.7) представляет собой рекуррентное соотношение, позволяющее находить волновую функцию в последующий момент времени по известному значению в предыдущий момент времени. Образно говоря, оператор  $U(\Delta t)$  производит вращение вектора состояния на бесконечно малый угол. Именно

выражение (5.7) мы собираемся положить в основу численного алгоритма. Проблема заключается в том, как подействовать оператором  $\mathcal{U}(\Delta t)$  на функцию  $|y(t)\rangle$ . Отметим, что  $\mathcal{U}(\Delta t)$  есть унитарный оператор, сохраняющий норму: Действительно, если  $\langle y(t)|y(t)\rangle=1$ , то

$$\langle y(t+\Delta t)|y(t+\Delta t)\rangle = \langle y(t)|\mathcal{U}^\dagger(\Delta t) \cdot \mathcal{U}(\Delta t)|y(t)\rangle = \langle y(t)|\mathbb{1}|y(t)\rangle = 1$$

то есть  $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = \mathbb{1}$ . Оператор  $\mathcal{U}(\Delta t)$  зависит от оператора  $\hat{H}$ , и его следует понимать как разложение этой функции в ряд Тейлора по степеням  $\hat{H}$ . Этот ряд содержит бесконечное число слагаемых, поэтому необходимо аппроксимировать оператор  $\mathcal{U}(\Delta t)$  простой функцией от  $\hat{H}$ , чтобы можно было выполнить численное действие оператором эволюции на вектор состояния.

## 5.2. Схема Кэли

Оператор эволюции на «маленьком» интервале времени  $\Delta t$ :

$$\mathcal{U}(\Delta t) = \exp\left(-i \frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}\right)$$

аппроксимируем выражением

$$\mathcal{U}(\Delta t) = \frac{\mathbb{1} - \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar}}{\mathbb{1} + \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar}}. \quad (5.8)$$

Соображения, приводящие к такому выражению, сводятся к следующему.

Разложение в ряд  $e^{-x}$  при малых  $x$  имеет вид:

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + o(x^5). \quad (5.9)$$

Аппроксимация этого выражения отношением

$$\frac{1 - x/2}{1 + x/2} = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{4} + \frac{x^4}{8} + o(x^5) \quad (5.10)$$

совпадает с предыдущим с точность до членов  $x^4$ , но оно явно сохраняет унитарность.

Выражение (5.7) с учетом (5.8) перепишем в виде

$$\left( \hat{\mathcal{F}}_+ \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar} \right) |y(t + \Delta t)\rangle = \left( \hat{\mathcal{F}}_- \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar} \right) |y(t)\rangle. \quad (5.11)$$

Чтобы воспользоваться выражением (5.11) для отыскания волновой функции в последующий момент времени,  $|y(t + \Delta t)\rangle$ , необходимо обратить оператор

$\left( \hat{\mathcal{F}}_+ \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar} \right)$ , стоящий слева в выражении (5.11). Мы покажем в следующем разделе,

что для этой цели может быть предложен быстрый алгоритм обращения, основанный на трех диагональной структуре матрицы. Отметим, что впервые такого сорта алгоритм в квантовой механике был реализован в [12]. Еще раньше таким же методом решалось уравнение диффузии (метод Кранка-Николсона) (см. [4,5]).

### 5.3. Алгоритм численного решения динамической задачи

Введем обозначения:  $t_j \equiv \Delta t \cdot j$ ,  $|y^j\rangle \equiv |y(t_j)\rangle$ . Тогда из (5.11), получаем:

$$\left( \hat{\mathcal{F}}_+ \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar} \right) |y^{j+1}\rangle = \left( \hat{\mathcal{F}}_- \frac{i\hat{H}\Delta t}{2\hbar} \right) |y^j\rangle. \quad (5.12)$$

Введем сетку в координатном пространстве:  $\Delta x = L/N$ ,  $x_n = \Delta x \cdot n$ , где  $L$  – рассматриваемая область движения. Обозначим  $y_n^j \equiv y^j(x_n)$  и  $V_n \equiv V(x_n)$ . Тогда:

$$(\hat{H}y^j)_n = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}(y_{n+1}^j + y_{n-1}^j - 2 \cdot y_n^j) + V_n y_n^j. \quad (5.13)$$

Уравнение (5.12) может быть записано в виде:

$$y_{n+1}^{j+1} + y_{n-1}^{j+1} + u_n y_n^{j+1} = F_n^{j+1}, \quad (5.14)$$

где

$$u_n = -2 - \frac{2m(\Delta x)^2 V_n}{\hbar^2} + \frac{4im(\Delta x)^2}{\hbar \Delta t}, \quad (5.15)$$

$$F_n^{j+1} = -(y_{n+1}^j + y_{n-1}^j + u_n^* y_n^j). \quad (5.16)$$

Будем искать решение уравнения (5.14) в виде:

$$y_{n+1}^{j+1} = R_n^{j+1} y_n^{j+1} + S_n^{j+1}. \quad (5.17)$$

Подставляя (5.17) в уравнение (5.14), мы получим соотношения для расчета вспомогательных величин  $R_n^j$  и  $S_n^j$ :

$$R_{n-1}^{j+1} = -\frac{1}{u_n + R_n^{j+1}}, \quad (5.18)$$

$$S_{n-1}^{j+1} = -\frac{F_n^{j+1} - S_n^{j+1}}{u_n + R_n^{j+1}}. \quad (5.19)$$

Пусть система находится в “ящике” с бесконечными стенками. В этом случае для волновой функции имеем следующие граничные условия:  $y_0^{j+1} = 0$  и  $y_N^{j+1} = 0$ . Тогда, учитывая соотношение (5.17), получаем начальные условия для  $R_n^j$  и  $S_n^j$ :

$$R_{N-1}^{j+1} = 0, \quad S_{N-1}^{j+1} = 0. \quad (5.20)$$

Таким образом, если мы знаем волновую функцию в начальный момент времени  $\mathcal{Y}_n^0$  во всех узлах решетки, то мы можем вычислить функцию  $F_n^1$  согласно (5.16). Вычислив  $R_n^1$  и  $S_n^1$  по формулам (5.18) и (5.19), воспользовавшись (5.17), найдем функцию  $\mathcal{Y}_n^1$ . Повторяя указанную процедуру шаг за шагом, мы найдем волновую функцию в любой момент времени.

#### 5.4. Спектральная функция

Если зависимость волновой функции от времени найдена, то имеется простой способ извлечь информацию об электронном спектре системы. Для этого построим спектральную функцию  $S(t)$ , спроектировав вектор  $|\mathcal{Y}(t)\rangle$  на начальное состояние:

$$S(t) = \langle \mathcal{Y}(0) | \mathcal{Y}(t) \rangle. \quad (5.21)$$

Разложив начальный вектор  $|\mathcal{Y}(0)\rangle$  по собственным функциям гамильтониана системы

$$|\mathcal{Y}(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (5.22)$$

где

$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (5.23)$$

и учитывая (5.2) и (5.3), мы получим:

$$S(t) = \sum_n |c_n|^2 e^{-iE_n t / \hbar}. \quad (5.24)$$

Выражение (5.24) обладает свойством:  $S(0) = 1$ , вытекающим из условия нормировки ( $\sum_n |c_n|^2 = 1$ ). Видно также, что каждое слагаемое в (5.24) осциллирует с частотой  $E_n / \hbar$ . Именно этим мы хотим воспользоваться, чтобы найти энергетические уровни системы  $E_n$ . Для этого умножим (5.24) на  $i$  и вычислим интеграл по некоторому (достаточно большому) промежутку времени  $T$ :

$$\operatorname{Re} \int_0^T e^{iEt/\hbar} S(t) dt = \sum_n |c_n|^2 \operatorname{Re} \int_0^T e^{i(E-E_n)t/\hbar} dt = \sum_n |c_n|^2 \frac{\sin(E-E_n)T/\hbar}{(E-E_n)/\hbar}, \quad (5.25)$$

где  $E$  играет роль спектрального параметра. Попробуем понять, как устроена правая часть (5.25). Имея в виду, что выражение:

$$d_T(x) = \frac{\sin xT}{px} \quad (5.26)$$

в пределе  $T \rightarrow \infty$  ведет себя как  $d$  - функция Дирака:

$$d(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} d_T(x), \quad (5.27)$$

мы видим, что (5.25) позволяет найти спектральную плотность уровней:

$$r(E) = \lim_{T \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \int_0^T e^{iEt/\hbar} S(t) dt = p\hbar \sum_n |c_n|^2 d(E-E_n). \quad (5.28)$$

Разумеется, мы не можем выполнять счет на компьютере «бесконечное» время, но мы можем получить спектральную плотность уровней с достаточной точностью, если выполним расчет вектора состояния за достаточно длинный промежуток времени. Понятно, что разрешение по частотам также определяется величиной  $\sim 1/T$ . Фактически, мы будем пользоваться «допредельным» выражением для спектральной плотности, которое определяется соотношением:

$$r_T(E) = \operatorname{Re} \int_0^T e^{iEt/\hbar} S(t) dt. \quad (5.29)$$

Отметим, что путем выбора начального состояния, или коэффициентов  $c_n$ , можно «просматривать» уровни в наперед заданном интервале.

## 5.4. Численная реализация

После того, как задано начальное состояние  $\psi(x,0)$ , волновую функцию необходимо нормировать, но не по всему пространству  $-\infty < x < +\infty$ , а в области

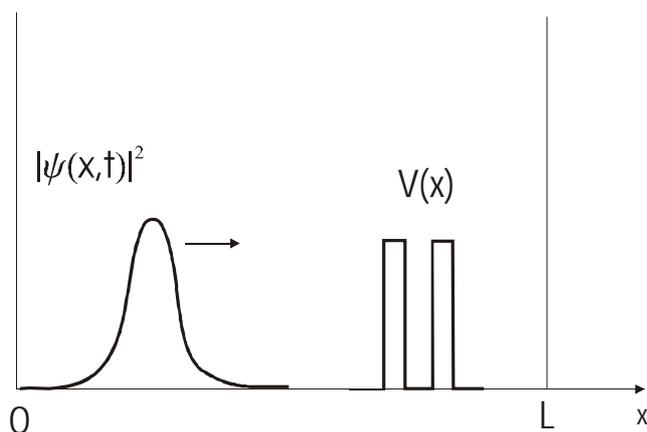


Рис. 5.2. Волновой пакт в «ящике» размером  $L$ , движется в потенциальном поле, создаваемом гетероструктурой

$0 < x < L$ . Перед тем, как решать уравнение (5.14), необходимо перейти к безразмерным переменным (к естественным единицам измерения), характерным для данной задачи:

$$\bar{x} = x / x_0, \quad \bar{E} = E / E_0, \quad \bar{t} = t / t_0.$$

Возьмем в качестве характерной длины область движения частицы:  $x_0 = L$ ; выберем единицу измерения энергии:  $E_0 = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$  и времени:  $t_0 = \frac{2mL^2}{\hbar}$ . Пространственная сетка содержит  $N$  шагов. В новых переменных выражение (5.15) примет вид:

$$u_n = -2 - \frac{V_n}{N^2} + \frac{2i}{N^2 \Delta t}.$$

Алгоритм решения задачи сводится к следующему:

1. Задаем волновую функцию начального состояния  $Y_n^j$  при  $j = 0$ . Эта функция является аналогом волнового пакета в непрерывном пространстве:

$$y(x,0) = A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2} + ikx\right), \text{ где } x_0 - \text{положение центра пакета, } a - \text{ширина пакета,}$$

$k$  - несущий волновой вектор.

2. Нормируем волновую функцию начального состояния на размерах ящика.

3. Вычисляем функцию  $F_n^j$  согласно (5.16).

4. Вычисляем  $R_n^{j+1}$  и  $S_n^{j+1}$  по формулам (5.18) и (5.19).

5. Находим функцию  $Y_n^{j+1}$  согласно (5.17).

6. Повторяя указанную процедуру шаг за шагом, находим волновую функцию в любой момент времени.

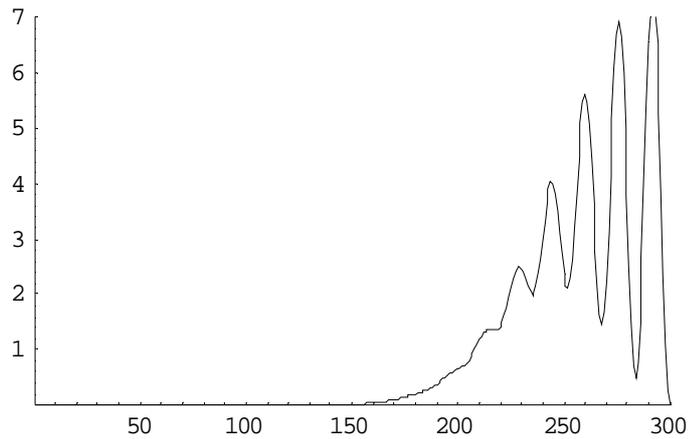
**Текст программы**

```

■ Динамика в ПО
Prep... Nm
Prep... Nm-2 and Array S, Nm-2
u n... D^2 - 2 V D
Tabl... Nm
y... Nm
R... Nm
S... Nm
Do... conjugate u
Nm-1
i = Nm;
while... i =
R i... i
i = Nm;
whi... ;
S...
y...
Do...
Pr... Nm
*... Nm
b =... Nm
List... ed
Il... n
Do y... Nm, 150

```

Результат работы программа: волновой пакет сталкивается со стенкой.



### 5.5. Вопросы и задания

1. Изучая движение пакета, получить коэффициенты прохождения и отражения для прямоугольной ямы и прямоугольного барьера.

2. Исследовать движение пакета в поле потенциальной ступеньки:

$$V(x) = V_0 \left(1 + th \frac{x}{2a}\right), \text{ меняя параметр } a.$$

3. Обобщить развитую в данном разделе методику на случай, когда волновой пакет может покинуть область рассеяния. Рассмотреть два случая: а) вне области действия потенциала ( $0 < x < L$ ) включено поглощение (добавлен комплексный потенциал); б) переформулировать граничные условия так, чтобы на границах области выполнялось условие излучения, т.е. волна могла только выходить из области ( $0 < x < L$ ).

4. Вычислить коэффициент прохождения для треугольного барьера

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ ax, & 0 < x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

5. Промоделировать динамику волнового пакета в полях:

$$\text{a) } V(x) = \begin{cases} a(x - L/2)^2, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

$$\text{б) } V(x) = \begin{cases} -\frac{a}{ch^2 a(x - L/2)}, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

6. Изучить движение волнового пакета в двухбарьерной структуре изображенной на рис. 5.2.
7. Написать фрагмент программы, позволяющей вычислять спектральную функцию согласно (5.21) и (5.29).
8. Волновую функцию, соответствующую уровню с энергией  $E_n$  можно получить, если взять интеграл  $\int_0^T e^{iE_n t/\hbar} |\psi(t)\rangle dt$ . Прделав вычисление аналогичное (5.25), получить явное выражение для волновой функции и обсудить метод ее вычисления.

## ГЛАВА 6. РЕЗОНАНСЫ БРЕЙТА-ВИГНЕРА И ФАНО В НАНОСТРУКТУРАХ

В классических учебниках по квантовой механике показывается, что резонансы Брейта-Вигнера [10] возникают благодаря интерференции двух встречных волн в одном и том же канале рассеяния (подобно резонансам Фабри-Перо в оптике). Резонансы Фано [16] имеют место благодаря интерференции состояний различных каналов. Данная ситуация не нашла внимания в учебной литературе. Цель данного раздела состоит в том, чтобы дать простое объяснение природы резонансов Фано.

Для уяснения сути дела обратимся сначала к аналогии. Известно, что резонансы в механических, электрических или оптических системах имеют общую природу. Пусть имеются два связанных осциллятора, причем пусть один из них возбуждается внешней гармонической силой (см. рис 6.1).

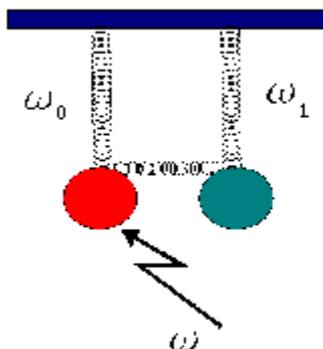


Рис. 6.1. Схематическое изображение двух связанных осцилляторов, совершающих колебания под действием внешней силы

Амплитуды колебаний осцилляторов находятся решением системы

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 + \gamma_1 \dot{x}_1 + \omega_1^2 x_1 + v_{12} x_2 &= a_1 e^{i\omega t}, \\ m_2 \ddot{x}_2 + \gamma_2 \dot{x}_2 + \omega_2^2 x_2 + v_{12} x_1 &= 0. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Решение уравнений ищем в виде

$$\begin{aligned} x_1 &= c_1 e^{i\omega t}, \\ x_2 &= c_2 e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Амплитуды определяются выражениями

$$c_1 = \frac{(w_2^2 - w^2 + ig_2 w)}{(w_1^2 - w^2 + ig_1 w)(w_2^2 - w^2 + ig_2 w) - v_{12}^2} a_1, \quad (6.3)$$

$$c_2 = -\frac{v_{12}}{(w_1^2 - w^2 + ig_1 w)(w_2^2 - w^2 + ig_2 w) - v_{12}^2} a_1. \quad (6.4)$$

Из приведенных выражений следует, что амплитуда первого осциллятора может обратиться в нуль при  $w = w_2$ , если коэффициент трения второго осциллятора  $\gamma_2 = 0$ .

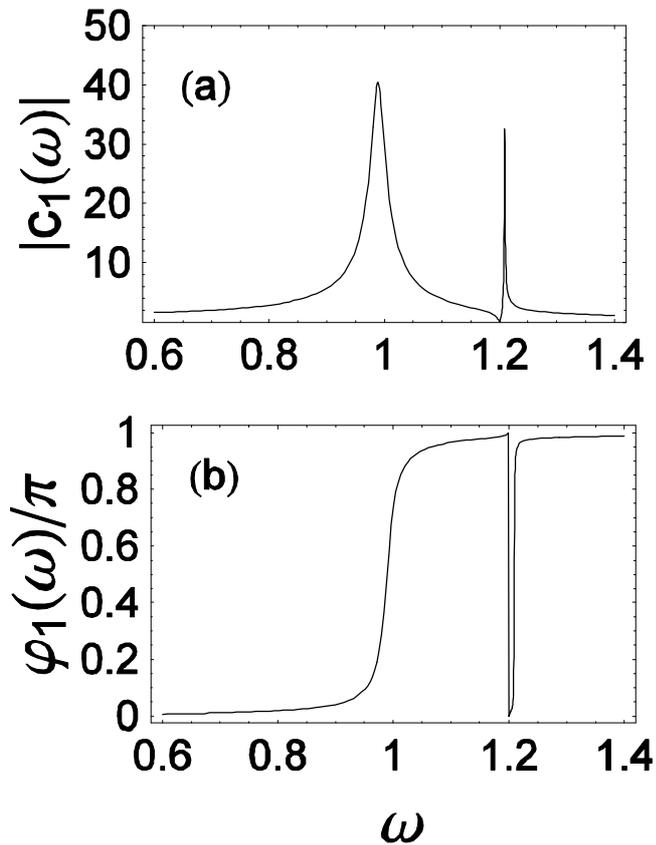


Рис. 6.2. Частотная зависимость амплитуды (а) и фазы (б) первого осциллятора

Эффект «замирания» имеет простое объяснение: когда частота колебания лежит между частотами связанных осцилляторов, один из них отстает по фазе, а второй опережает внешнее воздействие. Следовательно, при определенных параметрах первый осциллятор может остановиться.

## 6.1. Резонансы Брейта-Вигнера

Обратимся теперь к не менее известному объяснению природы резонансов Брейта-Вигнера [10] в простейшей квантовой системе (или резонансов Фабри - Перо в оптике). Пусть имеется двухбарьерная система. Свойства каждого барьера будем описывать амплитудными коэффициентами отражения и прохождения:  $t_1, r_1$  и  $t_2, r_2$ .

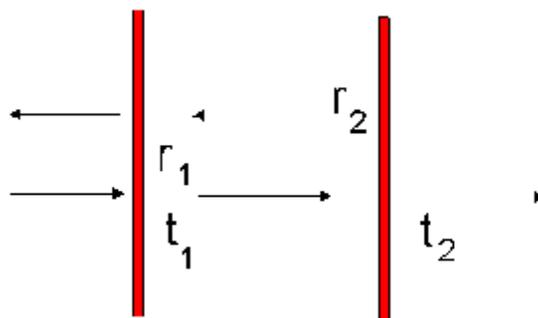


Рис. 6.3. Схема резонатора Фабри-Перо

Полная амплитуда прохождения определяется суммированием

$$t = t_2 t_1 + t_2 r_1 r_2 t_1 + \dots = t_2 \frac{1}{1 - r_1 r_2} t_1 . \quad (6.5)$$

Пусть парциальные амплитуды не имеют особенностей в рассматриваемом интервале энергий. Несмотря на это, результирующая амплитуда может иметь полюс. Для этого должно выполняться условие

$$1 - r_1 r_2 = 0 . \quad (6.6)$$

Поскольку коэффициенты отражения - комплексные функции, уравнение (6.6) имеет комплексные решения вида (мы опустим номер, считая, что можно рассматривать уединенные резонансы)

$$\tilde{E} = E_R - i\Gamma, \quad \Gamma > 0 \quad (6.7)$$

## 6.2. Резонансы в многоканальных системах

Рассмотрим теперь рассеивающий центр, находящийся в квазиодномерном канале

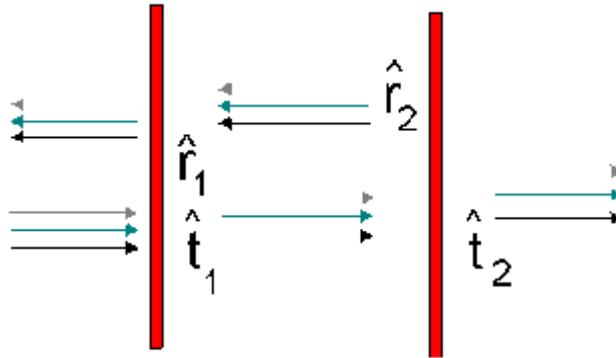


Рис. 6.4. Схема резонатора Фабри-Перо в случае многоканальной системы

Так как каждая яма в канале играет роль многоканального рассеивателя, то для описания рассеяния электрона используется обобщенная схема Фабри-Перо (см. рис. 6.4. ), согласно которой матрица двухъямной системы  $\hat{t}$  представляется в виде:

$$\hat{t} = \hat{t}_2 \hat{t}_1 + \hat{t}_2 \hat{r}_1 \hat{r}_2 \hat{t}_1 + \dots = \hat{t}_2 \left( 1 - \hat{r}_1 \hat{r}_2 \right)^{-1} \hat{t}_1. \quad (6.8)$$

Теперь полюса определяются выражением

$$\det \left( 1 - \hat{r}_1 \hat{r}_2 \right) = 0. \quad (6.9)$$

Однако, амплитуда рассеяния может обращаться в нуль помимо полюсов. Это связано с тем, что матрица  $\hat{t}$  может иметь нули, когда

$$\left( 1 - \hat{r}_1 \hat{r}_2 \right)_{ij}^{cof} = 0, \quad (6.10)$$

где  $\text{cof}$  – означает алгебраическое дополнение матрицы.

### 6.3. Многоканальное уравнение Шредингера

Придадим вышеприведенным рассуждениям большую конкретность. Рассмотрим туннелирование через квантовую точку в квазидвумерном канале. Решение двумерного уравнения Шредингера ищется в виде

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) \varphi_n(y), \quad (6.11)$$

где  $\varphi_n(y)$  – волновые функции поперечного движения. Амплитуды  $\psi_n(x)$ , описывающие движение электрона вдоль канала, определяются из бесконечной системы уравнений

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) + \sum_{n'=1}^{\infty} V_{n,n'}(x) \psi_{n'}(x) = (E - E_n) \psi_n(x), \quad (6.12)$$

где  $V_{n,n'}(x) = \int \varphi_n(y) V(x, y) \varphi_{n'}(y) dy$  – матричные элементы примесного потенциала,  $E_n$  – энергия поперечного движения.

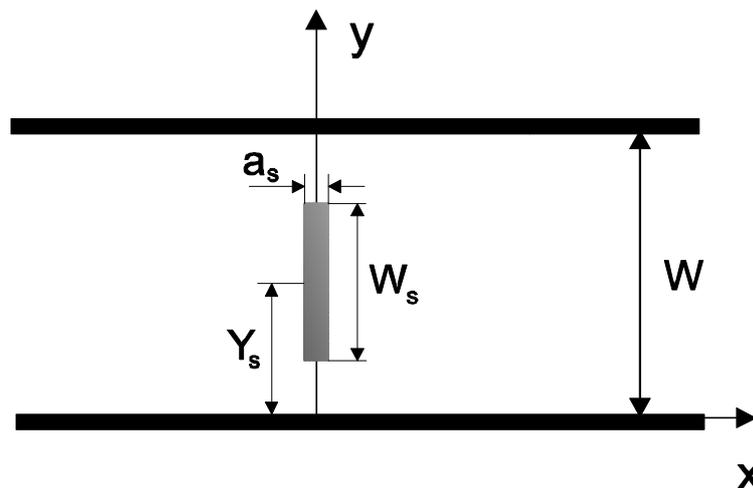


Рис. 6.5. Одномерный канал с притягивающим центром

Потенциальная матрица для короткодействующего центра в двухканальном приближении имеет вид

$$\hat{V}(x) = -\frac{\mathbf{h}^2}{m} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{12} & v_{22} \end{pmatrix} \delta(x), \quad (6.13)$$

Решение ищется в виде

$$\psi_1(x) = \begin{cases} a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}, & x < 0, \\ c_1 e^{-ik_1 x}, & x > 0, \end{cases} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\mathbf{h}^2} (E - E_1)}, \quad (6.14)$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} b_2 e^{|k_2| x}, & x < 0, \\ c_2 e^{-|k_2| x}, & x > 0, \end{cases} \quad |k_2| = \sqrt{\frac{2m}{\mathbf{h}^2} (E_2 - E)}. \quad (6.15)$$

Граничные условия дают

$$\begin{aligned} (ik_1 + v_{11})c_1 + v_{12}c_2 &= a_1, \\ v_{12}c_1 + (-|k_2| + v_{22})c_2 &= 0. \end{aligned} \quad (6.16)$$

или

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{ik_1(-|k_2| + v_{22})}{(ik_1 + v_{11})(-|k_2| + v_{22}) + v_{12}^2} a_1, \\ c_2 &= \frac{ik_1 v_{12}}{(ik_1 + v_{11})(-|k_2| + v_{22}) + v_{12}^2} a_1. \end{aligned} \quad (6.17)$$

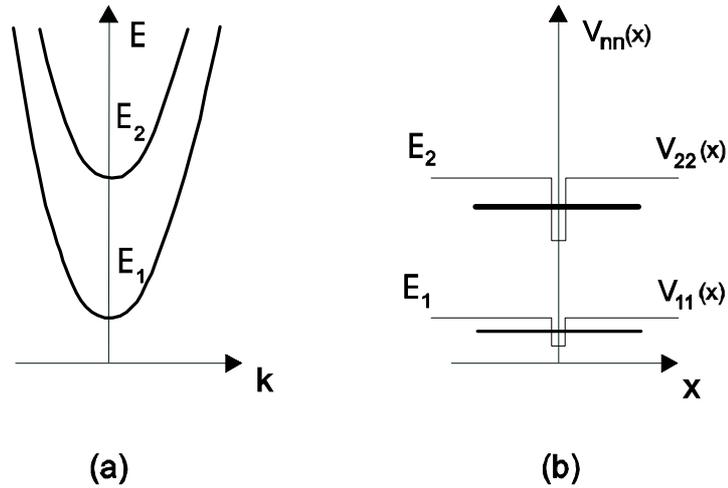


Рис. 6.6. (а) Закон дисперсии и (б) схема потенциального поля и уровней в многоканальной системе

Как видно из первого уравнения, амплитуда рассеяния  $t_{11} = c_1$  может обратиться в нуль при  $-|k_2| + v_{22} = 0$ . Амплитуда прохождения вблизи полюса и нуля приобретает вид [16]:

$$t_{11}(E) \sim \frac{E - E_0}{E - E_R + i\Gamma}, \quad (6.18)$$

где  $E_R$  и  $\Gamma$  – характеризуют положение и ширину резонанса, а  $E_0$  – энергия нуля амплитуды, когда имеет место полное отражение электрона от рассеивателя.

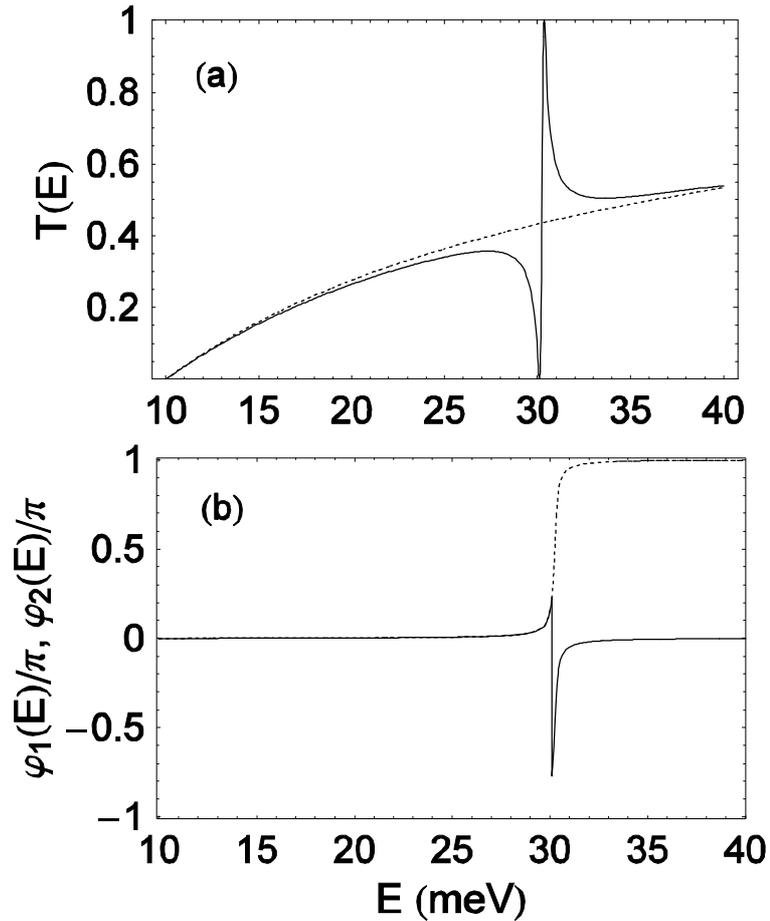


Рис. 6.7. (а) Прозрачность многоканальной системы и (б) скачек фазы вблизи резонанса Фано

Таким образом, мы можем сформулировать следующие выводы:

- В многоканальных системах имеется возможность, когда распространяющаяся волна в одном канале рассеивается и интерферирует с волной, локализованной в другом канале;
- Линейное взаимодействие таких волн может приводить к возникновению асимметричных резонансов Фано в транспортных и оптических характеристиках наноструктур.

#### 6.4. Вопросы и задания

1. Исследовать поведение фаз связанных осцилляторов вблизи резонанса.
2. Решить уравнение Шредингера (6.12) в двухканальном и трехканальном приближениях.
3. Построить  $S$ -матрицу в двухканальном приближении и изучить поведение матричных элементов в комплексной плоскости энергии.

## ГЛАВА 7. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В НАНОКАНАЛАХ

В квазиодномерных электронных волноводах с квантовыми точками возможны принципиально новые когерентные эффекты, когда распространяющаяся электронная волна интерферирует с локализованным состоянием на квантовой точке. В этом случае на фоне ступеней проводимости (прозрачности) волновода могут существовать резонансы Фано [16]. Изучение механизмов управления прозрачностью электронных волноводов имеет большое значение для приложений, поскольку на этом эффекте можно создавать резонансные наноэлектронные приборы нового типа. Для решения такого рода задач необходимо развить теорию рассеяния электронных состояний в волноводах с квантовыми точками. Следует отметить, что полюсная структура матрицы рассеяния, определяющая пики прозрачности, хорошо понята, тогда как эффекты, обусловленные полным отражением (существование провалов в прозрачности), недостаточно изучены. В данном разделе исследуется рассеяние электронных волн в квазиодномерном волноводе на квантовых точках, имеющих конечные размеры. Принципиально новым моментом здесь является то, что здесь возможна интерференция (конфигурационное взаимодействие) распространяющейся волны с волной, запертой в области примеси, причем это взаимодействие может качественно менять прозрачность волновода. Изложим резонансную теорию рассеяния, которая может быть использована для решения широкого круга вопросов теории электронного транспорта в наноканалах.

### 7.1 Модель электронного наноканала

Будем изучать рассеяние электронных волн в двумерном электронном волноводе шириной  $W$ , который расположен вдоль оси  $x$ . Пусть запирающий потенциал в поперечном направлении описывается функцией  $V_c(y)$ . Потенциал примесей будем описывать функцией  $V(x, y)$ . Схематически геометрия волновода представлена на рис. 7.1, где показаны линии уровней потенциального поля в волноводе.

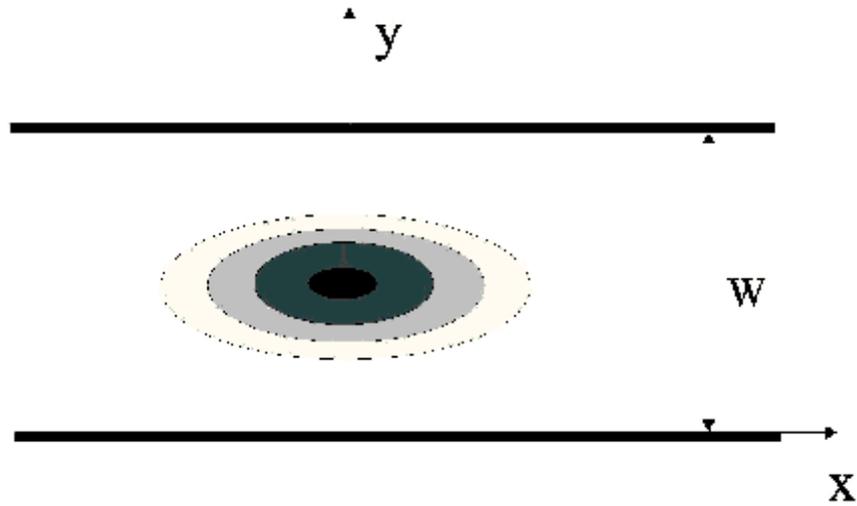


Рис.7.1. Схематическое изображение двумерного электронного волновода, содержащего притягивающую примесь. Показаны изолинии потенциала; разные цветовые оттенки характеризуют изменение потенциала

Волновая функция электрона может быть найдена из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) + V_c(x, y) \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (7.1)$$

где  $m$  - эффективная масса электрона. Для канала без примесей  $V(x, y)=0$ , и в этом случае, мы имеем решение (7.1) в виде

$$\begin{aligned} \psi_{n,k}^{(0)}(x, y) &= e^{ik_n x} \varphi_n(y), \\ E &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + E_n, \end{aligned} \quad (7.2)$$

где  $\varphi_n(y)$  и  $E_n$  определены решениями

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_c(y) \right\} \varphi_n(y) = E_n \varphi_n(y). \quad (7.3)$$

Волновую функцию  $\Psi(x, y)$  удобно разложить по полному базису функций поперечного движения

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) \varphi_n(y). \quad (7.4)$$

Подставив (7.4) в (7.2), находим уравнения для  $\psi_n(x)$  в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) + \sum_{n'=1}^{\infty} V_{nn'}(x) \psi_{n'}(x) = (E - E_n) \psi_n(x), \quad (7.5)$$

где

$$V_{nn'}(x) = \int \varphi_n(y) V(x, y) \varphi_{n'}(y) dy \quad (7.6)$$

-матричные элементы примесного потенциала. Система уравнений (7.5) полностью эквивалентна двумерному уравнению Шредингера. Следует отметить, что бесконечная система связанных уравнений типа (7.5) часто встречается в физике (линейная теория взаимодействия волн), а развитие методов решения таких уравнений представляет самостоятельный интерес.

Как показано в [9], вычисление кондактанса волновода с примесями в баллистическом режиме сводится к задаче рассеяния. Мы будем интересоваться амплитудой прохождения  $t_{nn'}$ , которая описывает рассеяние электронов из канала с номером  $n'$  в канал с номером  $n$ . Амплитуда прохождения может быть найдена решением (7.5). Кондактанс, измеряемый двухзондовым методом, определяется формулой Бьюттикера-Ландауэра [7]

$$G = \frac{2e^2}{h} T, \quad T = \sum_{n,n'} \frac{k_n}{k_{n'}} |t_{n,n'}|^2, \quad (7.7)$$

где  $T$  - прозрачность волновода,  $n$  и  $n'$  означают номера каналов падающих и рассеянных волн, а суммирование в (7.7) пробегает по всем распространяющимся для данной энергии  $E$  состояниям в квантовом волноводе. Отметим, что полюса

амплитуды рассеяния  $t_{n,n}(E)$  в комплексной плоскости  $E$  соответствуют уровням или резонансам, а ветвления – пороговым особенностям [10].

## 7.2 Матрица рассеяния и резонансное приближение

Теория резонансов, обусловленная связью локализованного состояния с состояниями открытых каналов была сформулирована много лет назад Фешбахом [17]. В настоящем разделе в рамках теории Фешбаха мы получим выражение для матрицы рассеяния электрона в волноводе, содержащем примесь конечного размера. При этом мы будем принимать во внимание произвольное число возможных связанных состояний в поле примеси.

### А. Матрица рассеяния

Начнем рассмотрение со случая, когда имеется только один открытый канал, т.е. энергия рассеивающегося электрона лежит в интервале  $E_1 < E < E_2$  (см. рис. 7.2 а).

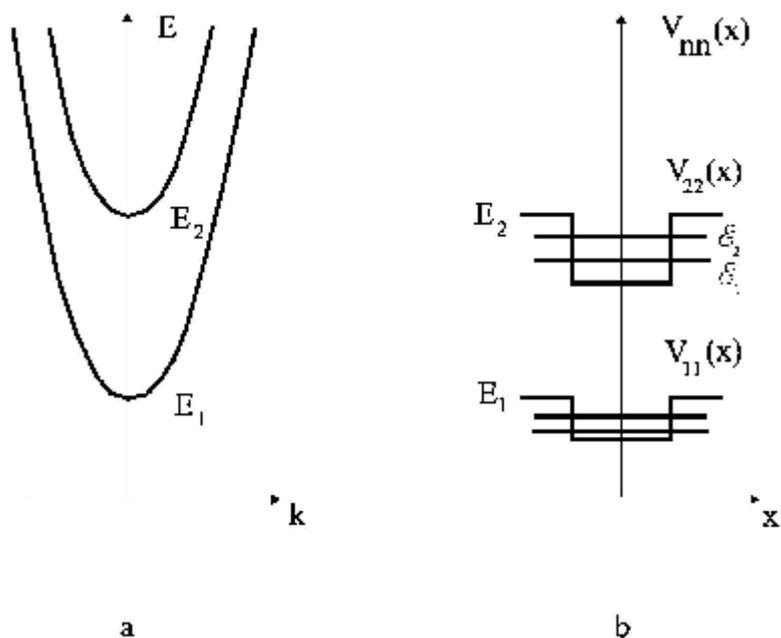


Рис. 7.2. Закон дисперсии носителей в идеальном волноводе (а) и схема расположения дискретных уровней в эффективных ямах (б)

Действуя согласно [17], мы сохраним только самые близкие по энергии (резонансные) слагаемые в системе уравнений (7.5), а отброшенные слагаемые затем можно будет учесть по теории возмущений. Иными словами, мы удержим в (7.5) слагаемые, содержащие  $\psi_1$  и  $\psi_2$ :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{11}(x) \right) \psi_1(x) + V_{12}(x) \psi_2(x) = (E - E_1) \psi_1(x), \quad (7.8)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{22}(x) \right) \psi_2(x) + V_{21}(x) \psi_1(x) = (E - E_2) \psi_2(x), \quad (7.9)$$

предполагая, что матричный элемент  $V_{12}$ , описывающий связь между каналами, мал по сравнению с расстоянием между подзонами квантования.

Удобней начать анализ с уравнения (7.9). Если в (7.9) пренебречь слагаемым с  $V_{21}$ , то оно приобретет вид одномерного уравнения Шредингера

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{22}(x) \right) \psi_2(x) = (E - E_2) \psi_2(x), \quad (7.10)$$

Если потенциал  $V_{22}(x)$  является притягивающим и достаточно велик по абсолютной величине, то при некоторых значениях энергии  $E$  будут существовать связанные состояния. В зависимости от параметров ямы  $V_{22}(x)$  в интервале энергий  $E_2 - \max|V_{22}(x)| < E < E_2$  уравнение (7.10) может иметь серию связанных состояний  $u_j$  с энергиями  $\varepsilon_j$  ( $j = 1, \dots, N$ ) (см. рис. 7.2 б), где функции  $u_j$  нормированы условиями

$$\langle u_j | u_{j'} \rangle = \delta_{jj'}. \quad (7.11)$$

Помимо дискретных уровней в поле потенциала  $V_{22}(x)$  обычно имеются состояния непрерывного спектра, которые мы обозначим  $u_v(x)$ . Принимая во внимание

локализованные состояния и состояния сплошного спектра, запишем решение (7.9) в виде

$$\psi_2(x) = \sum_{j=1}^N A_j u_j(x) + \int A_\nu u_\nu(x) d\nu \equiv \sum_{\lambda} A_{\lambda} u_{\lambda}(x), \quad (7.12)$$

где  $A_{\lambda} = (A_j, A_\nu)$  - пока произвольные амплитуды,  $\lambda = (j, \nu)$  - полный набор квантовых чисел,  $u_{\lambda} = (u_j, u_\nu)$ .

Подставляя (7.12) в (7.8) и учитывая ортогональность состояний  $u_{\lambda}(x)$ , получим формальные уравнения для амплитуд  $A_{\lambda}$ :

$$(E - \varepsilon_{\lambda}) A_{\lambda} = \langle u_{\lambda} | V_{21} | \psi_1(x) \rangle, \quad (7.13)$$

Теперь обратимся к уравнению (7.8). Перепишем его в виде

$$\left[ E - E_1 - \left( -\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{11}(x) \right) \right] \psi_1(x) = V_{12}(x) \psi_2(x), \quad (7.14)$$

В данном случае мы имеем дело с задачей рассеяния электрона в потенциальном поле  $V_{11}(x)$ . Формальное решение (7.14) может быть записано с помощью функции Грина:

$$|\psi_1\rangle = |\chi_E^+\rangle + G_1^+ V_{12} |\psi_2\rangle, \quad (7.15)$$

где  $|\chi_E^+\rangle$  представляет собой решение (7.14) с нулевой правой частью. Мы выбрали частное решение, соответствующее источникам, находящимся при  $x \rightarrow -\infty$ . Подставляя (7.15) в (7.13), получим явное уравнение для нахождения амплитуд  $A_{\lambda}$ :

$$(E - E_{\lambda}) A_{\lambda} - \sum_{\lambda'} U_{\lambda, \lambda'} A_{\lambda'} = F_{\lambda}, \quad (7.16)$$

где

$$\begin{aligned} U_{\lambda, \lambda'} &= \langle u_{\lambda} | V_{21} G_1 V_{12} | u_{\lambda'} \rangle, \\ F_{\lambda} &= \langle u_{\lambda} | V_{21} | \chi_E^+ \rangle. \end{aligned} \quad (7.17)$$

В свою очередь, функция  $\psi_1$  получается из (7.15), если в правую часть подставить  $\psi_2$ , определяемое уравнением (7.12):

$$|\psi_1\rangle = |\chi_E^+\rangle + \sum_{\lambda} G_1^+ V_{12} |u_{\lambda}\rangle A_{\lambda}. \quad (7.18)$$

Чтобы найти матрицу рассеяния  $t_{11}$ , определяемую асимптотическим поведением  $\psi_1(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$ :  $\psi_1(x) = t_{11} e^{ik_1 x}$ , нам потребуется выражение для функции Грина:

$$G_1^+(x, x') = \frac{m}{ik_1 \mathbf{h}^2 t} \begin{cases} \chi_E^+(x) \chi_E^-(x'), & x > x', \\ \chi_E^+(x') \chi_E^-(x), & x < x', \end{cases} \quad (7.19)$$

где  $\chi_E^+(x)$  и  $\chi_E^-(x)$  - соответственно, решения

$$\left( -\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{11}(x) \right) \chi_E^{\pm}(x) = (E - E_1) \chi_E^{\pm}(x), \quad (7.20)$$

с источниками при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Функция  $\chi_E^+(x)$  имеет следующие асимптотики:

$$\chi_E^+(x) = \begin{cases} te^{ik_1 x}, & x \rightarrow +\infty, \\ e^{ik_1 x} + re^{-ik_1 x}, & x \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (7.21)$$

а  $\chi_E^-(x)$  -

$$\chi_E^-(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x} + r'e^{ik_1x}, & x \rightarrow +\infty, \\ te^{-ik_1x}, & x \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (7.22)$$

где  $t$  - амплитуда прохождения, а  $r$  и  $r'$  - амплитуды отражения при рассеянии в поле  $V_{11}(x)$ .

Рассматривая асимптотику волновой функции  $\psi_1(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$ , исходя из (7.18) с учетом (7.19) и (7.20), получим

$$\psi_1(x) = te^{ik_1x} + \frac{me^{ik_1x}}{ik_1\hbar^2} \sum_{\lambda} \langle (\chi_E^-)^* | V_{12} | u_{\lambda} \rangle A_{\lambda}. \quad (7.23)$$

Следовательно, матрица рассеяния в канале  $1 \rightarrow 1$  определяется выражением

$$t_{11} = t \left\{ 1 + \frac{m}{ik_1\hbar^2 t} \sum_{\lambda, \lambda'} \langle (\chi_E^-)^* | V_{12} | u_{\lambda} \rangle (E - \varepsilon - U)^{-1}_{\lambda\lambda'} \langle u_{\lambda'} | V_{21} | \chi_E^+ \rangle \right\}. \quad (7.24)$$

Формула (7.24) позволяет описать взаимодействие резонансов при рассеянии электрона на примесях в электронном волноводе и интервале энергий  $(E_1, E_2)$ . Отметим, что в интервале энергий  $(E_2, E_3)$  следует учесть дополнительные резонансные состояния, обусловленные каналом 3, т.е. рассмотреть систему трех связанных уравнений и т.д.

### В. Резонансное приближение

Если энергия электрона близка к группе уровней в потенциальной яме  $V_{22}(x)$ , то именно эти связанные состояния будут наиболее сильно интерферировать с падающей волной. В данной группе связанных состояний важны те, для которых модули матричных элементов, связывающих эти состояния с состояниями непрерывного спектра, будут сравнимы с расстоянием между ближайшими уровнями.

Удержим в (7.16) только резонансные слагаемые, опустив нерезонансные состояния непрерывного спектра. Пусть число удерживаемых амплитуд определяется

числом связанных состояний в яме  $N$ . При этом явное уравнение для нахождения амплитуд  $A_j$  примет вид

$$\sum_{j'=1}^N M_{jj'} A_{j'} = F_j, \quad M_{jj'} = (E - \varepsilon_j) \delta_{jj'} - U_{jj'} \quad (7.25)$$

где

$$U_{jj'} = \langle u_j | V_{12} G_1 V_{12} | u_{j'} \rangle, \quad F_j = \langle u_j | V_{21} | \chi_E^+ \rangle. \quad (7.26)$$

Следовательно, в резонансном приближении матрица рассеяния в канале  $1 \rightarrow 1$  определяется выражением

$$t_{11} = t \left\{ 1 + \frac{m}{ik_1 \mathbf{h}^2 t} \times \right. \\ \left. \times \sum_{jj'} \langle (\chi_E^-)^* | V_{12} | u_j \rangle (M^{-1})_{jj'} \langle u_{j'} | V_{21} | \chi_E^+ \rangle \right\}. \quad (7.27)$$

Представление для амплитуды рассеяния в виде (7.27) замечательно тем, что оно позволяет в общем случае выявить резонансную структуру прозрачности канала. Формальное решение системы (7.25) пишется как

$$A_j = \frac{1}{\det M} \sum_{j'=1}^N (M^c)_{jj'} F_{j'}, \quad (7.28)$$

где  $M^c$  - кофактор матрицы  $M$ . Амплитуда рассеяния может быть записана в виде

$$t_{11}(E) = t(E) \frac{N(E)}{D(E)}, \quad (7.29)$$

где

$$\begin{aligned}
N(E) &= D(E) + \frac{m}{ik_1 \mathbf{h}^2 t} \times \\
&\times \sum_{j,j'} \langle (\chi_E^-)^* | V_{12} | u_j \rangle (M^c)_{jj'} \langle u_{j'} | V_{21} | \chi_E^+ \rangle, \\
D(E) &= \det M.
\end{aligned} \tag{7.30}$$

Как видно из приведенного выражения, полюсы амплитуды рассеяния определяются нулями функции  $D(E)$ , а её нули - нулями числителя  $N(E)$ .

Резонансная структура матрицы рассеяния существенным образом зависит от свойств матрицы  $U$ , определяемой в свою очередь, свойствами функции Грина и примесного потенциала  $V(x, y)$ . Будем специально выделять случай, когда матричный элемент обладает четностью относительно отражений  $x \rightarrow -x$  ( $V_{n,n'}(x) = V_{n,n'}(-x)$ ). Мы обсудим также случай потенциала общего положения, когда  $V_{n,n'}(x) \neq V_{n,n'}(-x)$ . Согласно теореме взаимности функция Грина обладает следующим свойством:

$$G_1(x, x') = G_1(x', x). \tag{7.31}$$

Если же потенциал примеси таков, что  $V_{1,1}(x) = V_{1,1}(-x)$ , то из уравнения для функции Грина вытекает дополнительное соотношение

$$G_1(x, x') = G_1(-x, -x'). \tag{7.32}$$

Используя теорему взаимности, нетрудно убедиться, что матрица  $U$  является симметричной ( $U_{jj'} = U_{jj}$ ). Для случая, когда потенциал примеси обладает четностью, легко показать, что матричные элементы  $U$  между состояниями с разной симметрией - симметричным  $s$  и - антисимметричным  $a$  - равны нулю:  $U_{sa} = 0$ .

Как видно из приведенных выше выражений, поведение амплитуды рассеяния определяется матричными элементами  $U_{jj'}$ . С помощью (7.19) для функции Грина, нетрудно преобразовать матричный элемент  $U_{jj'}$  к виду

$$U_{jj'} = \frac{m}{ik_1 \mathbf{h}^2 t} F_j R_{j'} + Q_{jj'}, \quad (7.33)$$

где

$$Q_{jj'} = -\frac{2m}{k_1 \mathbf{h}^2 |t|^2} \operatorname{Im} \left( \int_{-\infty}^{\infty} u_j(x) V_{12}(x) \chi^+(x) \int_x^{\infty} u_{j'}(x') V_{12}(x') \chi^{+*}(x') \right), \quad (7.34)$$

$$R_j = \langle (\chi_E^-)^* | V_{12} | u_j \rangle. \quad (7.35)$$

С учетом известных соотношений между волновыми функциями задачи рассеяния,

$$\begin{aligned} \chi_E^+ &= r \chi_E^{+*} + t \chi_E^{-*}, \\ \chi_E^- &= r' \chi_E^{-*} + t \chi_E^{+*}, \end{aligned} \quad (7.36)$$

матричным элементам  $U_{jj'}$  можно придать форму

$$\begin{aligned} U_{jj'} &= \frac{m}{2ik_1 \mathbf{h}^2 t} (F_j F_{j'}^* + R_j R_{j'}^*) + \frac{m}{2ik_1 \mathbf{h}^2 t} \left( \frac{r}{t} R_j F_{j'}^* - \frac{r^*}{t^*} F_j R_{j'}^* \right) + \\ &+ \frac{1}{2} (Q_{jj'} + Q_{j'j}). \end{aligned} \quad (7.37)$$

Отсюда, в частности, диагональные элементы можно записать как

$$U_{jj} = -i \frac{m}{2k_1 \mathbf{h}^2} (|F_j|^2 + |R_j|^2) + \frac{m}{k_1 \mathbf{h}^2} \operatorname{Im} \left( \frac{r}{t} R_j F_j^* \right) + Q_{jj}, \quad (7.38)$$

выделив тем самым явно реальные и мнимые части  $U_{jj}$ .

Вид знаменателя (7.29) может быть установлен в общем случае. Для этого приведем к диагональному виду комплексную симметричную матрицу  $M$ . Элементы

матрицы, осуществляющей унитарное преобразование, находятся решением системы однородных уравнений

$$\sum_{j'=1}^N (\varepsilon_j \delta_{jj'} + U_{jj'}) \Omega_{j'} = \tilde{\varepsilon} \Omega_j. \quad (7.39)$$

Пусть найден набор комплексных решений  $\tilde{\varepsilon}_\alpha$ , которые можно представить в виде

$$\tilde{\varepsilon}_\alpha = \varepsilon_\alpha^R - i\Gamma_\alpha, \quad (7.40)$$

тогда мы сможем записать знаменатель (7.30) как

$$D(E) = \prod_{\alpha} (E - \varepsilon_\alpha^R + i\Gamma_\alpha). \quad (7.41)$$

Из структуры выражения для матрицы  $M$  ясно, что  $\varepsilon_\alpha^R$  и  $\Gamma_\alpha$  суть функции энергии однако, как это следует из последующего анализа, при слабой связи между каналами рассеяния они слабо зависят от энергии.

Выражение  $N(E)$ , стоящее в числителе (7.29), может иметь нули, которые будут означать возможность полного отражения волн в волноводе с примесями. Ниже мы продемонстрируем на конкретных примерах, как находятся эти нули и обсудим возможные следствия для прозрачности канала.

В случае, когда параметры ямы таковы, что в ней имеется небольшое число уровней (число резонансов), можно получить общее выражение для амплитуды рассеяния. Рассмотрим случай симметричной примеси. Пусть в яме имеется одно связанное состояние. Используя выражения (7.29) и (7.30) с учетом (7.37), найдем

$$t_{11}(E) = t(E) \frac{E - \varepsilon_1^0}{E - \varepsilon_1^R + i\Gamma_1}, \quad (7.42)$$

где ведены действительные параметры резонанса

$$\begin{aligned}\varepsilon_1^0 &= \varepsilon_1 + Q_{11}, & \varepsilon_1^R &= \varepsilon_1 + Q_{11} + \Delta_{11}, \\ \Delta_{11} &= \frac{m}{\mathbf{h}^2 k_1} |F_1|^2.\end{aligned}\tag{7.43}$$

Как следует из (7.42), амплитуда прохождения, а следовательно, и прозрачность, имеет структуру резонанса Фано: на потенциальном фоне, определяемом амплитудой  $t(E)$ , при энергии равной  $\varepsilon_1^R$  имеется пик шириной  $\Gamma_1$  и нуль при энергии  $\varepsilon_1^0$ . Отметим, что ширина пика определяется матричным элементом, связывающим локализованное состояние с континуум состояний зоны 1.

В том случае, когда в симметричной яме имеется два уровня, возможно взаимодействие уровней только за счет виртуальных переходов в континуум. Амплитуда прозрачности теперь приобретает вид

$$t_{11}(E) = t(E) \frac{(E - \varepsilon_1^0)(E - \varepsilon_2^0) + \gamma_1 \gamma_2}{(E - \varepsilon_1^R + i\Gamma_1)(E - \varepsilon_2^R + i\Gamma_2)},\tag{7.45}$$

где

$$\begin{aligned}\varepsilon_1^0 &= \varepsilon_1 + Q_{11}, & \varepsilon_2^0 &= \varepsilon_2 + Q_{22}, \\ \gamma_1 &= \Gamma_1 + \Delta_{11}, & \gamma_2 &= \Gamma_2 + \Delta_{22}, \\ \Delta_{11} &= \frac{m}{\mathbf{h}^2 k_1} |F_1|^2 \operatorname{Im}\left(\frac{r}{t}\right), \\ \Delta_{22} &= \frac{m}{\mathbf{h}^2 k_1} |F_2|^2 \operatorname{Im}\left(\frac{r}{t}\right), \\ \Gamma_1 &= \frac{m}{\mathbf{h}^2 k_1} |F_1|^2, & \Gamma_2 &= \frac{m}{\mathbf{h}^2 k_1} |F_2|^2, \\ \varepsilon_1^R &= \varepsilon_1 + Q_{11} + \Delta_{11}, & \varepsilon_2^R &= \varepsilon_2 + Q_{22} + \Delta_{22}.\end{aligned}$$

Видно, что "затравочные" уровни непосредственно не взаимодействуют ( $U_{12} = 0$ ), но они связаны матричным элементом, описывающим переход с локализованного уровня в зону 1. Это приводит к тому, что положения двух имеющихся на действительной оси энергии нулей зависят от параметра связи локализованных состояний с континуумом. Амплитуда рассеяния имеет также два полюса. Таким образом, резонансы Фано могут

эффективно взаимодействовать. Ниже мы покажем, что это может привести к ряду интересных следствий.

В случае трех уровней, возможно как взаимодействие уровней с континуумом, так и их непосредственное взаимодействие, поскольку теперь отличен от нуля матричный элемент между состояниями с одинаковой четностью, т.е. ( $U_{13} \neq 0$ ).

Фактический расчет матрицы рассеяния в резонансном приближении нетрудно выполнить численными методами для любой примеси. Для этого необходимо построить локализованные состояния в одномерной яме  $V_{22}(x)$  и состояния рассеяния в яме  $V_{11}(x)$ . Затем найти матричные элементы и решить линейную систему (7.25). Полученное выражение позволяет исследовать зависимость прозрачности от параметров потенциала рассеяния. Результаты таких расчетов будут приведены ниже.

### 7.3 Интерференция резонансных состояний

Теперь мы используем общие выражения, полученные выше для амплитуды рассеяния в резонансном приближении, чтобы исследовать интересные интерференционные эффекты в электронных волноводах с рассеивателями различного типа.

#### А. Уединенный резонанс

Для начала изучим резонанс в случае примеси, которая имеет конечный поперечный размер, при этом ее размер вдоль канала считаем малым по сравнению с длиной волны электрона (см. рис. 7.2 а). Матричные элементы потенциала определяются выражением

$$V_{mn'}(x) = -\frac{\hbar^2}{m} v_{mn'} \delta(x), \quad (7.48)$$

где  $v_{mn'} > 0$ . В этом случае от подзоны  $n = 2$  отщепляется один уровень, который будет взаимодействовать с состояниями подзоны  $n = 1$ . Решение уравнения (7.10) может давать только одно связанное состояние в энергетическом интервале  $E_1 < E < E_2$ :

$$\varepsilon_1 = E_2 - \frac{\mathbf{h}^2 v_{22}^2}{2m} \quad (7.49)$$

с волновой функцией

$$u_1(x) = \sqrt{v_{22}} \exp(-v_{22}|x|). \quad (7.50)$$

Амплитуда рассеяния  $t \equiv t(E)$  находится решением (7.20); ее можно записать в виде

$$t(E) = \frac{ik_1}{ik_1 + v_{11}}. \quad (7.51)$$

При этом  $t(E)$  является монотонной функцией энергии, поскольку ее полюс лежит вне интервала  $E_1 < E < E_2$ . Матричные элементы, определяющие резонансную структуру  $t_{11}$ , равны

$$F_1^2 = \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 v_{22} t}{m}, \quad U_{11} = \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 v_{22} t}{imk_1}. \quad (7.52)$$

Подставив полученные выражения в (29.2), получим

$$N(E) = E - \varepsilon_1, \quad D(E) = E - (\varepsilon_1 + \Delta_1) + i\Gamma_1, \quad (7.53)$$

где

$$\Delta_1 = \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 v_{22} v_{11}}{m(k_1^2 + v_{11}^2)}, \quad \Gamma_1 = \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 v_{22} k_1}{m(k_1^2 + v_{11}^2)}. \quad (7.54)$$

Подчеркнем, что именно кофигурационное взаимодействие уровня в яме  $V_{22}(x)$  с состоянием непрерывного спектра подзоны  $n = 1$  приводит к возникновению асимметричного резонанса в прозрачности.

$$E_1 < E < E_2.$$

## В. Интерференция резонансной пары

Более интересные интерференционные эффекты возникают в том случае, когда возможно взаимодействие резонансов. Как известно, резонансы Брейта-Вигнера при взаимодействии отталкиваются, тогда как для резонансов Фано возможно новое явление, которое называется коллапсом резонансов. В рамках развитой выше теории исследуем коллапс резонансов на примере двух ям каждая из которых описывается матрицей типа (7.48). Для этого нам потребуются явные выражения для соответствующих матричных элементов. Матричные элементы  $V_{n,n'}(x)$  для двухъямной системы определяются выражением

$$V_{n,n'}(x) = -\frac{\hbar^2}{m} v_{n,n'} \left( \delta \left( x - \frac{L}{2} \right) + \delta \left( x + \frac{L}{2} \right) \right) \quad (7.56)$$

В рассматриваемом случае четность сохраняется и мы можем по отдельности рассмотреть четные и нечетные состояния рассеяния. Решая (7.10) для четных состояний, находим

$$u_s(x) = \begin{cases} a_s \operatorname{ch}(k_2|x|), & |x| < L/2, \\ b_s e^{-k_2|x|}, & |x| > L/2, \end{cases} \quad (7.57)$$

где  $a_s$ , и  $b_s$  - константы, которые определяются граничными условиями и нормировкой. Условие существования симметричного уровня с энергией  $\varepsilon_s$ , лежащего ниже  $E_2$ , гласит

$$\operatorname{th}(|\theta_2|) = \frac{2v_{22}L}{|\theta_2|} - 1. \quad (7.58)$$

Аналогично может быть найдена энергия нечетного состояния  $\varepsilon_a$  (этот уровень существует только при определенных параметрах системы). Столь же просто решить задачу рассеяния в поле двух ям, т.е. получить амплитуды волн в канале  $n = 1$ . Нам потребуются в дальнейшем только амплитуды прохождения и отражения, которые имеют вид

$$t = \frac{k_1^2}{e^{-2i\theta_1} (k_1 + iv_{11})^2 + e^{2i\theta_1} v_{11}^2}, \quad (7.59)$$

$$r = -1 + \frac{t}{k_1} \left( (k_1 + iv_{11}) e^{-2i\theta_1} + iv_{11} e^{2i\theta_1} \right).$$

Легко видеть, что для рассматриваемого потенциала все матричные элементы, определяющие резонансную амплитуду рассеяния, выражаются через  $r$ ,  $t$  и функции связанных состояний (приведем явное выражение только для симметричных состояний):

$$F_s = -\frac{\mathbf{h}^2 v_{12} u_s (L/2)}{m} (1 + r + t), \quad R_s = F_s, \quad (7.60)$$

$$U_{ss} = 2 \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 u_s^2 (L/2)}{m i k_1} (1 + r + t). \quad (7.61)$$

В результате вычисления резонансной амплитуды прохождения получим

$$t_{11}(E) = t \left\{ 1 + \frac{m}{i k_1 \mathbf{h}^2 t} \left( \frac{F_s^2}{E - \varepsilon_s - U_{ss}} - \frac{F_a^2}{E - \varepsilon_a - U_{aa}} \right) \right\}. \quad (7.62)$$

Используя явные выражения для  $r$  и  $t$ , выделим реальные и мнимые части у матричных элементов  $U_{ss}$  симметричного состояния

$$U_{ss} = \Delta_s - i\Gamma_s,$$

$$\Delta_s = 4 \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 u_s^2 (L/2)}{m} \frac{(k_1 \sin \theta_1 + 2v_{11} \cos \theta_1) \cos \theta_1}{(k_1 \sin \theta_1 + 2v_{11} \cos \theta_1)^2 + k_1^2 \cos^2 \theta_1}, \quad (7.63)$$

$$\Gamma_s = 4 \frac{\mathbf{h}^2 v_{12}^2 u_s^2 (L/2)}{m} \frac{k_1 \cos^2 \theta_1}{(k_1 \sin \theta_1 + 2v_{11} \cos \theta_1)^2 + k_1^2 \cos^2 \theta_1}.$$

Аналогично для нечетного состояния

$$U_{aa} = \Delta_a - i\Gamma_a,$$

$$\Delta_a = -4 \frac{\hbar^2 v_{12}^2 u_a^2 (L/2)}{m} \frac{(k_1 \cos \theta_1 - 2v_{11} \sin \theta_1) \sin \theta_1}{(k_1^2 \cos^2 \theta_1 - 2v_{11} \sin \theta_1)^2 + k_1^2 \sin^2 \theta_1}, \quad (7.64)$$

$$\Gamma_a = 4 \frac{\hbar^2 v_{12}^2 u_a^2 (L/2)}{m} \frac{k_1 \sin^2 \theta_1}{(k_1^2 \cos^2 \theta_1 - 2v_{11} \sin \theta_1)^2 + k_1^2 \sin^2 \theta_1}.$$

Следовательно, полюсная часть амплитуды рассеяния может быть записана как

$$D(E) = (E - (\varepsilon_s + \Delta_s) + i\Gamma_s) (E - (\varepsilon_a + \Delta_a) + i\Gamma_a). \quad (7.65)$$

Выражение, стоящее в числителе амплитуды прохождения и определяющее ее нули, имеет вид

$$N(E) = (E - \varepsilon_s)(E - \varepsilon_a) - 4 \frac{\hbar^2 v_{12}^2}{mk_1} \left( (E - \varepsilon_a) u_s^2 \left( \frac{L}{2} \right) - (E - \varepsilon_s) u_a^2 \left( \frac{L}{2} \right) \right) \sin \theta_1 \cos \theta_1. \quad (7.66)$$

Важное наблюдение заключается в том, что характеристики резонансов суть осциллирующие функции параметров системы. Пусть мы меняем расстояние между ямами. В этом случае одна из ширин, например, ширина симметричного резонанса  $\Gamma_s$  может обратиться в нуль. При этом произойдет схлопывание (коллапс) резонанса. Из (7.63) следует, что для этого должно выполняться условие

$$\cos \theta_1 = 0. \quad (7.67)$$

При выполнении условия (7.67) полюс перемещается на действительную ось, а его энергия будет в точности совпадать с энергией нуля.

#### 7.4. Выводы

Мы исследовали эффекты интерференции между распространяющимися и локализованными состояниями в квазиодномерных электронных волноводах, содержащих притягивающие примеси (квантовые точки) конечных размеров. Предложенный подход позволяет исследовать резонансную структуру амплитуды прохождения частицы через электронный волновод, в котором присутствуют квантовые точки произвольной формы. Показано, что квантовые точки, имеющие конечную протяженность, создают серию квазисвязанных состояний, которые проявляются как резонансно-антирезонансные пары в прозрачности. Приведенные результаты явно демонстрируют, что во всех рассмотренных случаях резонансы Фано обусловлены интерференцией распространяющегося электронного состояния с квазисвязанными состояниями. Резонансы Фано имеют универсальную структуру и характеризуются тремя действительными параметрами  $(\varepsilon^R, \varepsilon^0, \Gamma)$ . При изменении параметров примеси нули и полюса резонансов движутся в соответствие с изменением положения уровней в яме. В случае симметричной квантовой точки возможно столкновение полюса и нуля, которое приводит к коллапсу и свингу резонанса Фано. Развита теория позволяет изучать взаимодействие асимметричных резонансов в ямах произвольного вида. Предсказанные эффекты могут быть обнаружены в электронных волноводах с квантовыми точками.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы сделали только первые шаги в освоении численных методов решения уравнения Шредингера и немного научились понимать физику наноструктур. Мы показали, что для использования компьютера, необходимо научиться записывать уравнение Шредингера в конечных разностях. Здесь важно быть уверенным, что разностное уравнение правильно передает физику, а точность аппроксимации является достаточной. Интуитивно ясно, что пространственный шаг дискретизации должен быть много меньше характерной длины волны частицы, а временной - много меньше характерных обратных частот, определяемых энергетическими уровнями системы. Мы лишь кратко остановились на обсуждении этой проблемы. Стоит указать на один полезный прием, который предоставляет нам компьютерное моделирование. Идея в том, что мы можем начинать расчет с определенного шага, а затем уменьшая шаг в два раза, контролировать точность счета и чувствительность расчетной схемы к выбору шага.

Итак, задача сформулирована, можно начинать счет. Казалось бы, можно во всю использовать методы дискретной математики и линейной алгебры для решения разностных (приближенных) уравнений. Однако, здесь есть принципиальная проблема, ограничивающая наши возможности. Дело в том, что скорость выполнения матричных операций зависит от размерности матриц. Алгоритм решения можно считать эффективным, если он требует минимального числа операций. Будем иметь в виду одномерные задачи. Пусть размер матрицы равен  $N \times N$ . Например, в случае задачи рассеяния размер матрицы во внутренней области определяется числом узлов сетки. В случае задачи на собственные значения мы имеем дело с матрицей, представляющей гамильтониан на дискретном числе узлов. При этом метод решения задачи рассеяния требует выполнения  $\sim N$  операций, т.е. данный метод является быстрым. Методы диагонализации заполненной матрицы требуют выполнения  $\sim N^3$  операций (см. [5]). Такие методы являются медленными. Следовательно, основной проблемой методов вычислений является разработка быстрых алгоритмов решения квантово-механических задач. Современная вычислительная физика далеко продвинулась в данном направлении.

Я попытаюсь перечислить кратко, что здесь имеется нового и что стоило бы еще понять:

1) Ускоренные матричные методы решения стационарного уравнения Шредингера. Суть этих методов сводится к записи уравнения Шредингера в конкретном базисе (можно использовать сеточные функции, собственные функции вспомогательного Гамильтониана и т.д), то есть в сведении уравнения к матричной задаче на собственные значения и собственные вектора. В настоящее время развиты экономные (итерационные и неитерационные) методы отыскания собственных векторов и собственных значений матриц большого размера, основанных на предварительном вращении матриц. Кратко такие алгоритмы и программы имеются в описании библиотеки IMSL [13].

2) Проблема здесь состоит в том, что для диагонализации матриц требуется много времени. Например, на персональном компьютере практически можно диагонализировать за разумное время матрицу  $10000 \times 10000$ . Важным представляется поиск быстрых и устойчивых методов решения задачи на собственные функции и собственные векторы. Укажем здесь метод Уилкинсона, который апробирован нами для одно- и двумерного уравнения Шредингера. Мы предлагаем читателю самостоятельно поискать такое обобщение.

3) Метод фазовой функции может быть обобщен на многомерный случай. Например, в двумерном случае необходимо ввести двумерную область и аналог фазовой функции (в данном случае необходимо ввести матрицы фаз).

4) Методы решения многомерной задачи рассеяния. Развитая в пособии методика допускает обобщение на многомерный случай. Подумайте, как это можно сделать.

5) Метод быстрого преобразования Фурье [4]. Суть метода сводится к тому, что оператора Гамильтона расщепляется на сумму операторов кинетической и потенциальной энергии; соответственно оператор эволюции расщепляется на произведение. Действие операторов на состояние осуществляется путем разложения в ряды Фурье и последующим умножением. Этот метод является быстрым, поскольку требуется  $N^2 \ln N$  на один шаг по времени.

б) В последнее время предложены явные и неявные схемы решения временного уравнения Шредингера. Один из наиболее перспективных состоит в аппроксимации оператора эволюции с помощью полиномов Чебышева [14].

В последнее время большое внимание уделяется развитию методов решения уравнения Шредингера для многочастичных систем. Понятно, что размерность

матриц для таких систем катастрофически растет. Выход состоит в том, чтобы для многочастичных систем использовать теорию самосогласованного поля. В квантовой механике ранее был предложен метод Хартри-Фока [7], который успешно применялся в атомной физике. Эффективный метод, разработанный Коном и Шемом в конце прошлого века, все чаще используется для расчета конденсированных систем [15].

Чтобы освоить указанные методы, стоит обратиться к специальной литературе (для начала см. список литературы и ищи в Internet!).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Механика. М.: Наука, 1988.
2. Гулд Х., Тобочник Я., Компьютерное моделирование в физике. т. 1-2. М.: Мир, 1990.
3. Кунин С., Вычислительная физика. М.: Мир, 1991.
4. Koopin S.E., Meredith D.C., Computational Physics (Fortran version). Plenum. 1993.
5. Калиткин Н.Н., Численные методы. М.: Наука, 1978.
6. Годунов С.К., Рябенский В.С., Введение в теорию разностных схем. Физматгиз, 1977.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
8. Ю. П., Кардона М., Основы физики полупроводников. М.: Физматлит, 2002.
9. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А., Физика квантовых низкоразмерных структур. Москва: "Логос", 2000.
10. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М., Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
11. Фейнман Р., Лайтон Р., Сендс М., Фейнмановские лекции по физике, Вып. 9, гл. 11,14. М.: Мир, 1977.
12. Goldberg A., Schey H. M., Schwartz J. L.// Am. J. Phys. V. 35. P. 177 (1967).
13. Бартеньев О.В., ФОРТРАН для профессионалов. – М.: Диалог, МИФИ, 2001.
14. Kozloff R.// J. Phys. Chem. V. 92. P. 2087 (1988).
15. Martin R.M., Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. University of Illinois, Urbana-Champaign, 2004.
16. Fano U. // Phys. Rev. V. 124. P.1866 (1961).
17. Feshbach H.// Ann. Phys. V. 5. P. 357 (1958).