

УДК 51:530.145

УПРАВЛЕНИЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕМ В СИСТЕМЕ ДВУХ КОНЦЕНТРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ КОЛЕЦ С ПОМОЩЬЮ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

А. А. Брызгалов¹, Ф. И. Карманов¹

На примере двухъямного потенциала продемонстрирована работа квантового устройства, состоящего из двух концентрических колец и управляемого переменным магнитным полем. Туннелирование электронов между кольцами моделируется с помощью метода расщепления по физическим факторам, использующего предварительно рассчитанные уровни энергии и собственные функции с различными значениями напряженности магнитного поля. Производится оценка необходимого числа базисных функций при расчетах методом расщепления по физическим факторам для различных модельных ситуаций.

Ключевые слова: задача на собственные значения, асимметричный двухъямный потенциал, нестационарное уравнение Шредингера, переменное магнитное поле, туннелирование электронов, концентрические квантовые кольца, управление положением волнового пакета.

1. Введение. Модельные двухъямные потенциалы широко используются в различных разделах физики, химии, биологии, кристаллографии. Безусловно, подобные потенциалы являются отличным тестом для методов описания туннельного эффекта. Достаточно подробно вопросы туннелирования в квантовых структурах рассматриваются в [1, 2], в том числе на основе двухъямных потенциалов. Если рассмотреть двухъямный потенциал в цилиндрической геометрии, то такая модель в определенной степени будет воспроизводить систему двух коаксиально расположенных квантовых колец.

Недавние экспериментальные исследования подтвердили возможность получения концентрических квантовых колец на основе материала GaAs/AlGaAs [3–5]. Предполагаемое применение — использование таких наноструктур в качестве рабочих элементов для оптоэлектронных устройств. Таким образом, изучение процессов туннелирования в нестационарном режиме становится актуальной задачей.

Цель работы — воспроизвести временную динамику волновых функций электронов в двухъямном потенциале и продемонстрировать возможности управления положением волнового пакета в подобной системе с помощью магнитного поля. Для этого требуется решить задачу на собственные значения для нескольких значений напряженности магнитного поля, получив таким образом совокупность наборов значений энергии и собственных функций, а затем использовать эти данные в методе расщепления по физическим факторам [6, 7] для решения нестационарного уравнения Шредингера [8]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(p + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где для вектор-потенциала предполагается следующая зависимость от напряженности магнитного поля: $\mathbf{A}(t) = \{0; H(t)r/2; 0\}$. Метод расщепления по физическим факторам является более эффективным по сравнению с традиционными численными методами стрельбы и прогонки [9]. Суть метода расщепления по физическим факторам заключается в разделении взаимодействия с потенциалом и магнитным полем. На практике это означает замену системы уравнений двумя системами упрощенного типа.

Поведение волнового пакета в двухъямном потенциале во многом сходно со случаем стандартного потенциала квантового кольца, а именно, имеют место периодические процессы. Определяющим фактором является форма эффективного потенциала и положение минимума [10], на основе чего выдвигается идея управления положением волнового пакета в пространстве, пользуясь возможностью менять магнитное поле.

В работе [11] рассматривалось управление характеристиками туннелирования с помощью электрического поля для периодических структур. В качестве одного из примеров приводился двухъямный потенциал. Результаты работы [11] согласуются с результатами, которые будут приводиться в данной статье далее.

¹ Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ, Студгородок 1, 249040, г. Обнинск, Калужская обл.; А. А. Брызгалов, аспирант, e-mail: sandro185@mail.ru; Ф. И. Карманов, доцент, e-mail: fikarm@yandex.ru

2. Решение задачи на собственные значения и собственные функции. Рассмотрим потенциал, показанный на рис. 1:

$$U(r) = \begin{cases} a_1/r^2 + a_2r^2 - V_0, & r \leq x_0; \\ a_3/r^2 + a_2r^2 - V_1, & r > x_0, \end{cases} \quad (2)$$

где x_0 — точка сшивки. Для последних двух случаев, показанных на рисунке, правая яма исчезает из-за сильного влияния магнитного поля. При построении графиков использовались следующие параметры: $x_0 = 524.9$ нм; $a_1 = 1.82044 \times 10^7$ мэВ·нм²; $a_2 = 4.44400 \times 10^{-4}$ мэВ·нм⁻²; $a_3 = 5.40260 \times 10^7$ мэВ·нм²; $V_0 = 179.9$ мэВ; $V_1 = 309.9$ мэВ.

Будем решать стационарное уравнение Шредингера $H\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$ отдельно для каждой из двух областей. Гамильтониан $H = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(p + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + U(\mathbf{r})$ определяется согласно (1). Сделав переход к цилиндрическим координатам и выполнив подстановку вида $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(r) \exp(im\phi)$ (зависимость по z опускаем ввиду симметрии задачи), получим уравнение

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{4r^2} + \left(\frac{m}{r} - \frac{a_n^2}{2} \right)^2 \right) \psi_{I,II}(r) + U_{I,II} \psi_{I,II}(r) = E \psi_{I,II}(r).$$

Величина a_n является магнитной длиной [12] и связана с напряженностью магнитного поля: $a_n = \sqrt{\frac{\hbar c}{eH(t)}}$. Решение для потенциала квантового кольца вида

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2r^2 - V_0 \quad (3)$$

получено в [13]. Так как в каждой области имеем потенциалы одного типа, запишем решение в виде функций Уиттекера [14]

$$\Psi_{I,II} = C_{1,3} \frac{M(s_{I,II}, b_{I,II}, x)}{r} + C_{2,4} \frac{W(s_{I,II}, b_{I,II}, x)}{r},$$

где C_1, C_2 — соответствуют решению в первой области, C_3, C_4 — соответствуют решению во второй области,

$$s_{I,II} = -\frac{m + a_n^2(E - V_{0,1})}{2\sqrt{1 + 4a_2a_n^4}},$$

$$b_{I,II} = \frac{\sqrt{a_{1,3} + m^2}}{2},$$

$$x = \frac{r^2 \sqrt{1 + 4a_2a_n^4}}{2a_n^2}.$$

Из условия ограниченности волновых функций имеем $\psi_I(r = 0) = 0$, $\psi_{II}(r = \infty) = 0$. Отсюда получим, что $C_2 = 0$ и $C_3 = 0$; следовательно,

$$\psi_I = C_1 \frac{M(c_I, b_I, x)}{r}, \quad (4)$$

$$\psi_{II} = C_4 \frac{W(c_{II}, b_{II}, x)}{r}. \quad (5)$$

Будем применять условия непрерывности для волновых функций и их производных в точке сшивки: $\psi_I|_{r=x_0} = \psi_{II}|_{r=x_0}$; $\psi_I'|_{r=x_0} = \psi_{II}'|_{r=x_0}$. Таким образом, получаем систему однородных линейных уравнений

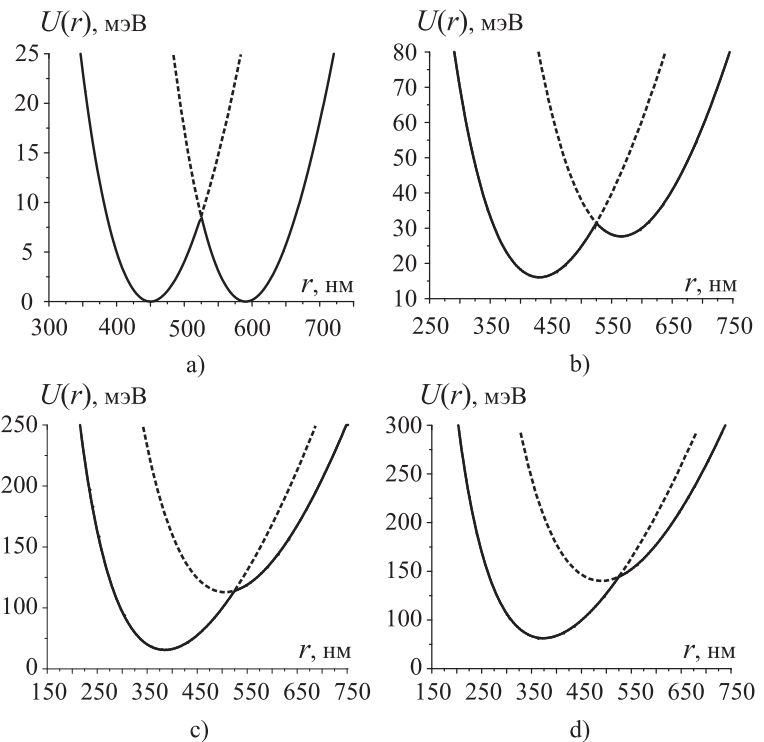


Рис. 1. Двухъямный (эффе́ктивный) потенциал для значений напряженности магнитного поля H . На рис. 1а значение $H = 0$ Гс, на рис. 1б — $H = 5000$ Гс, на рис. 1с — $H = 10784$ Гс, на рис. 1д — $H = 12229$ Гс

относительно C_1 и C_4 , при этом матрица B системы уравнений имеет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} M(c, b, x(x_0)) & W(c, b, x(x_0)) \\ -M(c, b, x(x_0)) \left(\frac{1}{x_0^2} + D_2 \right) + D_1 M(1 + c, b, x(x_0)) & 4W(1 + c, b, x(x_0)) - D_3 W(c, b, x(x_0)) \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$D_1 = \frac{\sqrt{1 + 4a_2 a_n^4}}{a_n^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{a_n^2 m - a_n^4 (E - V_0)}{(1 + 4a_2 a_n^4) x_0^2} \right),$$

$$D_2 = \frac{-m + \sqrt{1 + 4a_2 a_n^4} (1 + \sqrt{a_1 + m^2}) + a_n^2 (E_1 + V_0)}{\sqrt{1 + 4a_2 a_n^4} x_0^2},$$

$$D_3 = \frac{1}{2x_0^2} \left(\frac{1}{a_n^2 \sqrt{1 + 4a_2 a_n^4}} (2a_n^2 (\sqrt{1 + 4a_2 a_n^4} - m) - x_0^2) - 2a_n^4 (E - 2a_2 x_0^2 + V_1) \right).$$

Для определения значений уровней энергии необходимо потребовать, чтобы определитель матрицы B равнялся нулю: $\text{Det}(B) = 0$. Вид функции представлен на рис. 2. Поиск корней уравнения можно осуществить, например, с помощью метода Ньютона [15]. Как видно из рисунка, начиная от значений энергии вблизи 28 мэВ в системе возникают сдвоенные уровни. Получив значения для энергии E_n , можно рассчитать коэффициенты C_1 и C_4 и волновые функции в соответствии с условием нормировки

$$\int_0^\infty |\Psi(r)|^2 r dr = 1. \tag{6}$$

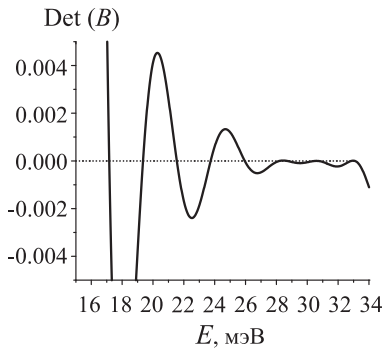


Рис. 2. К оценке положения корней уравнения $\text{Det}(B) = 0$ для значения напряженности магнитного поля $H = 5000$ Гс

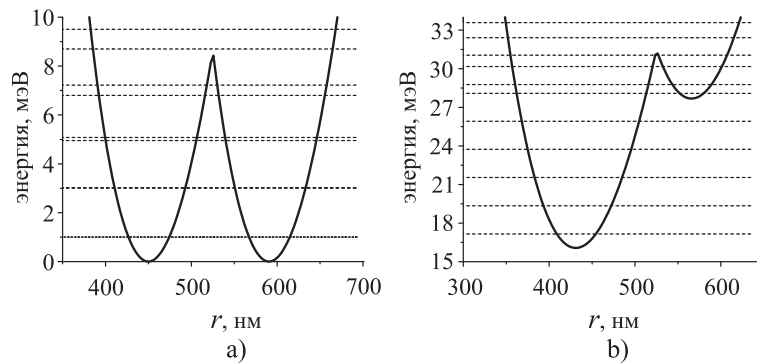


Рис. 3. Расщепление уровней энергии в слабом (а) и сильном (б) магнитном поле

В табл. 1 представлены значения уровней энергии. На рис. 3 можно проследить расщепление уровней, характерное для двухъямных потенциалов как в случае слабого, так и сильного магнитного поля. Для первого случая нижние уровни сливаются, в то время как для случая сильного магнитного поля сдвоенные уровни появляются для энергий, сравнимых со значением минимума внешней ямы. Кроме того, с ростом n влияние барьера, разделяющего квантовые кольца, становится все менее значимым: расстояние между уровнями энергии приближается к фиксированной величине, а волновые функции повторяют форму, характерную для стандартного потенциала квантового кольца (рис. 4).

3. Туннелирование волнового пакета в двухъямном потенциале. Рассмотрим движение электрона с эффективной массой $\mu = 0.067m_e$, где m_e — масса электрона, и зарядом e в системе двух концентрических квантовых колец, пронизываемых магнитным полем. Будем считать, что $r \leq x_0$ — область, соответствующая внутреннему кольцу, а $r > x_0$ — область, соответствующая внешнему кольцу. В расчетах, представляемых в настоящей статье, $x_0 = 524.9$ нм.

Получив собственные функции и собственные значения стационарной задачи, перейдем к рассмотрению нестационарного случая (1). Решение методом расщепления по физическим факторам для потенциала

Таблица 1

Значения уровней энергии E (мэВ) для различных значений напряженности магнитного поля

$H, \text{ Гс}$	n										
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1.005	1.006	3.006	3.0242	4.956	5.078	6.800	7.223	8.699	9.504	10.870
5000	17.162	19.353	21.543	23.733	25.921	28.085	28.770	30.168	31.053	32.408	33.586
10784	66.926	69.670	72.413	75.157	77.900	80.644	83.387	86.131	88.875	91.618	94.362
12230	82.731	85.650	88.569	91.488	94.408	97.327	100.246	103.165	106.085	109.004	111.923

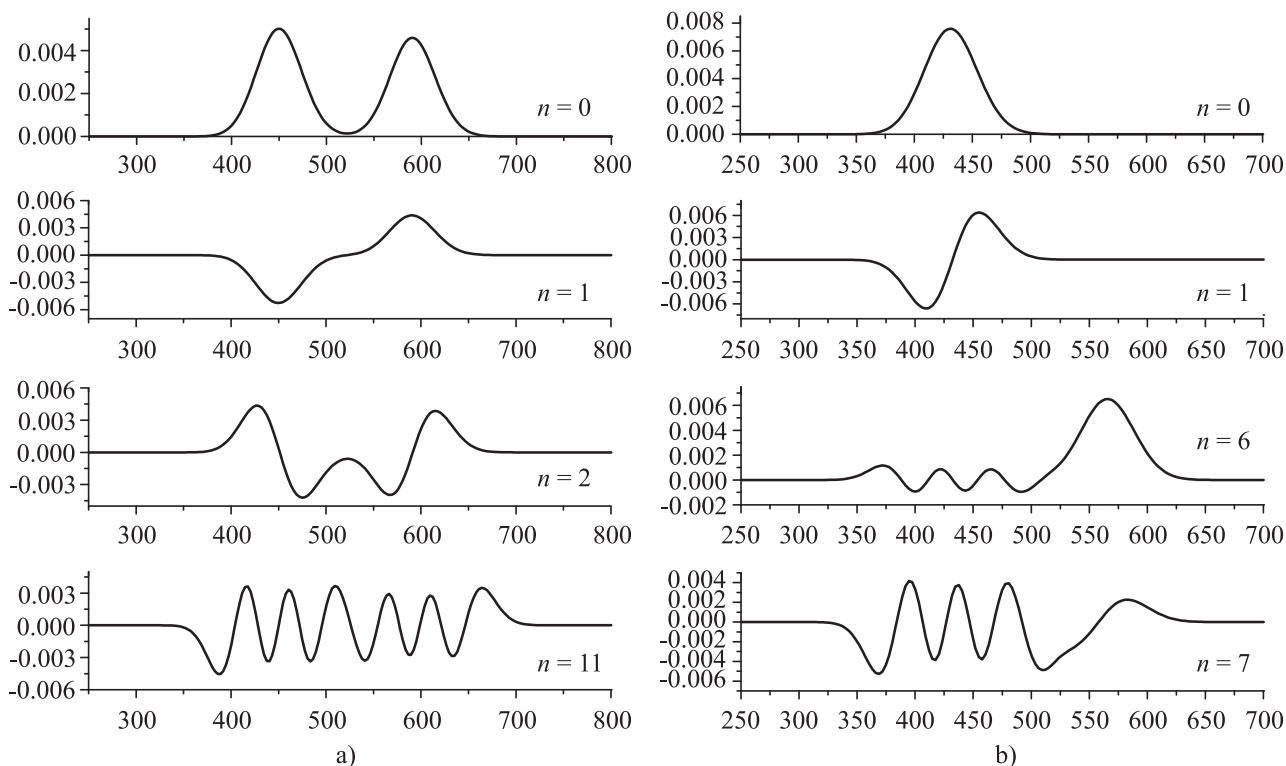


Рис. 4. Примеры собственных волновых функций $\psi_{n,0}(r)$ для случаев слабого (а) и сильного (б) магнитного поля

квантового кольца было получено в работе [9]. Здесь выпишем только общее решение, которое в данном случае получается аналогичным образом, как в [9]:

$$\Psi_{nm}(r, \phi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} C_{nm} \psi_{nm}(r) \exp(im\phi) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{nm} \tau\right) \exp\left(-i \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left(\frac{m}{a_n^2} - \frac{r^2}{4a_n^4}\right) dt\right), \quad (7)$$

где $\psi_{nm}(r)$ определяется согласно (4) и (5), $\tau = t_j - t_{j-1}$ — шаг по времени, C_{nm} — нормировочный коэффициент, определяемый согласно условию нормировки волновой функции (6).

Рассмотрим динамику движения волнового пакета в двухъямном потенциале отдельно для случаев сильного и слабого магнитных полей, вычисляя волновую функцию с помощью соотношения (7) последовательно на каждом шаге по времени. Зафиксируем $m = 0$ для упрощения процедуры, т.е. $\exp(im\phi) = 1$ и зависимость от ϕ дальше не рассматривается. Начальный вид волновой функции выберем следующим образом: $\Psi(r, 0) = A \exp\left(-\frac{(r - r_0)^2}{2\sigma^2}\right)$, где параметр расчета A вычисляется на основе условия нормировки волновой функции в начальный момент, $\sigma = 15$, а параметр r_0 варьируется в зависимости от расчетного случая и будет указываться отдельно. Для описания процесса туннелирования через барьер, разделяющий

два потенциала, рассмотрим поведение плотности вероятности с течением времени:

$$P = \int_0^{\infty} |\Psi_{nm}(r, t)|^2 r dr. \tag{8}$$

Плотность вероятности, соответствующая нахождению частицы в левой ($0 < r \leq x_0$) и правой ($x_0 < r < \infty$) частях области определения эффективного потенциала, имеет вид [1]

$$P_{\text{left}} = \int_0^{x_0} |\Psi_{nm}(r, t)|^2 r dr, \tag{9}$$

$$P_{\text{right}} = \int_{x_0}^{\infty} |\Psi_{nm}(r, t)|^2 r dr. \tag{10}$$

Среднее значение координаты центра волнового пакета вычисляется по формуле [16]

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} \Psi_{nm}(r, t) r \Psi_{nm}^*(r, t) r dr. \tag{11}$$

Между плотностями вероятностей, определяемыми формулами (8)–(10), имеет место соотношение $P = P_{\text{left}} + P_{\text{right}}$.

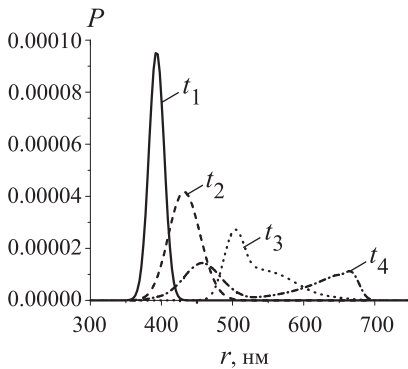


Рис. 5. Плотность вероятности P в выбранные моменты времени $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$

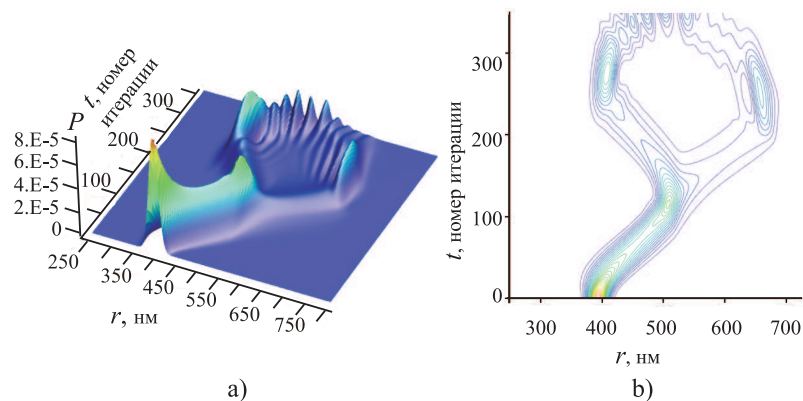


Рис. 6. Туннелирование волнового пакета: а) трехмерный график, б) линии уровней для плотности вероятностей

На рис. 5 показана плотность вероятности (8) в различные моменты времени. В соответствии с общими представлениями о туннелировании через барьер произвольной формы, часть волнового пакета проходит сквозь барьер, а часть отражается от него. Чтобы оценить поведение волнового пакета в двухъямном потенциале, рассмотрим рис. 6. Продемонстрированный расчет производился с шагом $\tau = \frac{2T}{350 \times 75}$, где T — период колебаний волнового пакета в потенциале квантового кольца (3). Как видно из рисунка, каждая часть волнового пакета испытывает колебания с периодами, отвечающими колебаниям в отдельном потенциале квантового кольца. Кроме того, процесс туннелирования в такой модели является обратимым: часть волнового пакета, прошедшая через барьер, возвращается обратно в исходное положение. Таким образом, если частица протуннелировала из одного кольца в другое, то через некоторое время она вернется в исходное кольцо.

Последнее утверждение хорошо прослеживается из рис. 7, на котором показаны вероятности, задаваемые формулами (9)–(11). Как видно из рисунка, для определенного стартового значения r_0 вероятность нахождения частицы за барьером превышает вероятность нахождения частицы перед барьером. Однако с течением времени ситуация изменяется, и уже вероятность нахождения перед барьером превалирует. Из рассмотрения рисунков в совокупности можно заключить, что динамика вероятностей существенно

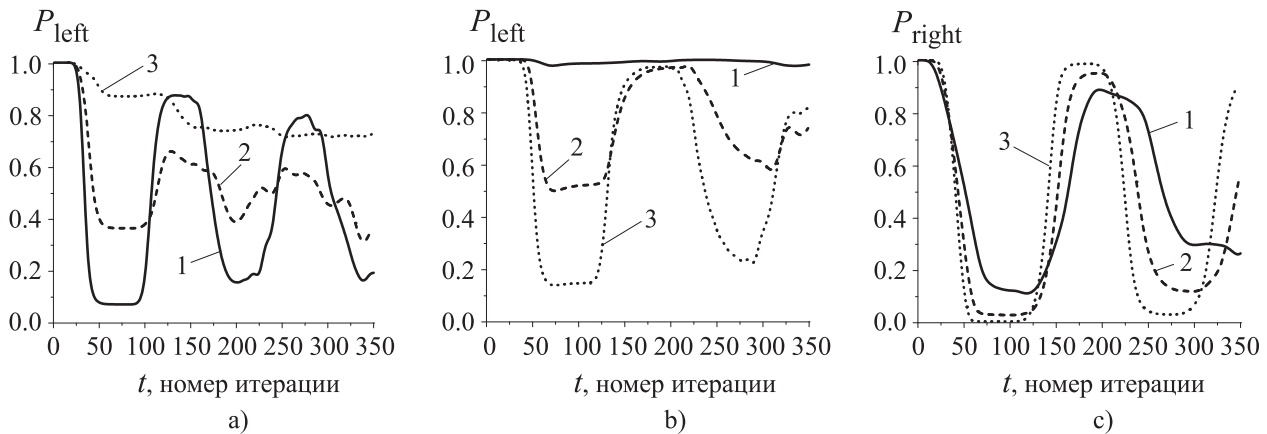


Рис. 7. Плотности вероятностей нахождения электрона в левой и правой части двухъямного потенциала для случаев слабого и сильного магнитного поля. На рис. 7а кривая 1 соответствует $r_0 = 373$ нм, кривая 2 — $r_0 = 390$ нм, кривая 3 — $r_0 = 410$ нм. На рис. 7б кривая 1 соответствует $r_0 = 353$ нм, кривая 2 — $r_0 = 333$ нм, кривая 3 — $r_0 = 320$ нм. На рис. 7с кривая 1 соответствует $r_0 = 570$ нм, кривая 2 — $r_0 = 590$ нм, кривая 3 — $r_0 = 610$ нм

зависит от влияния магнитного поля, а также от стартовой точки: при запуске пакета из внешней ямы туннелирование более вероятно, особенно в сильном магнитном поле.

Еще одним важным моментом является то, что в нулевом магнитном поле для частицы чуть легче преодолевать барьер из внешней части потенциала. Данная особенность объясняется несимметричностью выбранного типа потенциала. Однако разница незначительна. Если рассмотреть случай сильного магнитного поля, то ситуация усугубляется. Как видно на рис. 7, из-за того, что форма эффективного потенциала существенно изменяется, переход из внутреннего кольца во внешнее крайне маловероятен, в то время как из внешнего кольца туннелирование происходит без “сопротивления” барьера. Кроме того, с некоторой величины напряженности магнитного поля сам барьер будет отсутствовать как таковой из-за того, что минимум внешнего потенциала окажется за точкой сшивки x_0 , и потенциал будет иметь лишь некий излом (рис. 1). В таком случае движение волнового пакета будет напоминать ситуацию с колебаниями в стандартном потенциале квантового кольца.

4. Оценка количества собственных функций и собственных значений для расчетов туннелирования волнового пакета. При выборе $m = 0$ решение нестационарного уравнения Шредингера (7) может быть записано в виде следующего разложения по собственным базисным функциям стационарной задачи:

$$\psi(r, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(r, t), \tag{12}$$

где C_n — спектральные коэффициенты разложения, получаемые из начального условия, для которых имеет место условие полноты

$$\sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 = 1. \tag{13}$$

С практической точки зрения понятно, что в суммировании (12) необходимо оставить некоторое конечное число слагаемых N , так как ряд быстро сходится.

В потенциалах вида (2) или (3) из-за колебаний волнового пакета необходимо верно оценивать точки поворота и соответствующие им энергетические состояния, поскольку именно они будут давать максимальный вклад в сумму (12) при нахождении волнового пакета в этих точках. В случаях, когда переключения магнитного поля не происходит, одна из точек поворота является стартовой точкой, чего уже достаточно для понимания того, какие энергетические состояния необходимо учесть. Например, для случая, показанного на рис. 8, максимальный вклад дает коэффициент с $n = 13$, а также близлежащие состояния. Следует также отметить, что спектральные коэффициенты зависят от времени и переопределяются на каждом временном шаге, поэтому будем рассматривать максимальное значение конкретного спектрального коэффициента за расчетный временной интервал.

Рассмотрим ситуации с нулевым и сильным магнитным полем отдельно. В статье [17] в качестве вели-

чины, определяющей точность производимых вычислений, предлагается использовать $\epsilon_s = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2$.

Однако даже при расчетах с 5 базисными функциями имеем $\epsilon_s < 10^{-4}$, поэтому в качестве оцениваемых величин будем рассматривать значения $\max |C_n(t)|^2$ — слагаемое, которое дает максимальный вклад в сумму (13) (n отсчитывается от нуля), и отношение

$$d = \frac{|C_{N+1}(t)|^2}{\max (|C_n(t)|^2)}, \tag{14}$$

которое характеризует приблизительную погрешность из-за отбрасывания последующих членов ряда (13). Данные по расчетам с нулевым магнитным полем приведены в табл. 2.

Согласно данным табл. 2, использование 10 базисных функций актуально только лишь в случае, когда волновой пакет испытывает незначительные колебания (стартовые точки для волнового пакета $r_0 = 450$ нм и $r_0 = 430$ нм, 450 нм — положение минимума эффективного потенциала). Использование 30 базисных функций сохраняет хорошую точность даже при существенных отклонениях волнового пакета от точки минимума эффективного потенциала.

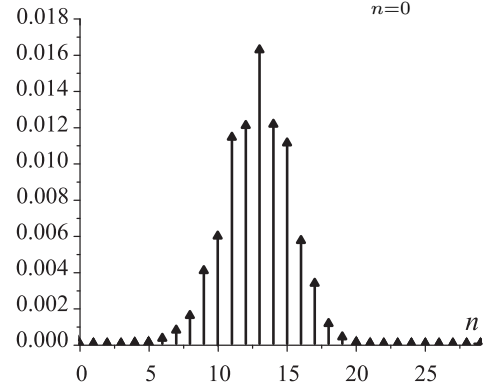


Рис. 8. Вклад отдельных коэффициентов C_n в сумму (13) для расчета с нулевым магнитным полем и $r_0 = 373$ нм

Таблица 2
Оценочные характеристики ряда (13) в зависимости от числа используемых базисных функций и стартовой точки движения волнового пакета r_0 для нулевого магнитного поля

	N	r_0				
		450	430	410	390	373
$\max C_n ^2$	9	$C_1 = 0.225$	$C_1 = 0.077$	$C_5 = 0.035$	$C_9 = 0.049$	$C_9 = 0.146$
	19	$C_1 = 0.224$	$C_1 = 0.077$	$C_5 = 0.034$	$C_9 = 0.022$	$C_{13} = 0.017$
	29	$C_1 = 0.224$	$C_1 = 0.077$	$C_5 = 0.034$	$C_9 = 0.022$	$C_{13} = 0.016$
d	N	r_0				
		450	430	410	390	373
	9	1.4×10^{-4}	8.0×10^{-4}	6.6×10^{-3}	1.0	1.0
	19	8.0×10^{-10}	5.0×10^{-12}	1.2×10^{-7}	1.3×10^{-5}	2.3×10^{-2}
29	2.8×10^{-15}	1.2×10^{-14}	1.6×10^{-14}	3.6×10^{-15}	2.3×10^{-9}	

Для случая сильного магнитного поля показательными значениями r_0 являются стартовые точки, отвечающие противоположным краям потенциала. Согласно рис. 1, эффективный потенциал для напряженности магнитного поля в 5000 Гс имеет основной минимум во внутреннем кольце и вторичный минимум, соответствующий внешнему кольцу. Временная динамика волнового пакета формируется относительно основного минимума, в связи с чем вероятность туннелирования через барьер, разделяющий кольца, является максимальной при старте из внешнего кольца и достаточно малой при запуске волнового пакета из внутреннего кольца. Расчеты, соответствующие стартовым точкам $r_0 = 610$ нм и $r_0 = 320$ нм из табл. 3, требуют максимальной точности, поскольку для учета энергетических состояний в точках поворота в потенциале (2) необходимо применять базис, состоящий из более чем 30 собственных функций.

В большинстве случаев можно ограничиться количеством в 20–30 базисных функций, тем не менее в основных расчетах, представляемых далее, применялся базис из 36 функций. В данном разделе рассматривались ситуации с постоянным магнитным полем, однако погрешности, связанные с вычислением суммы (12) для случаев переменного магнитного поля, требуют отдельного контроля.

5. Управление положением волнового пакета в потенциале квантового кольца с помощью магнитного поля. В качестве одного из возможных приложений метода расщепления по физическим факторам (процессам) рассмотрим вопросы управления локализацией волнового пакета сначала в потенциале отдельного квантового кольца, а затем (в следующем разделе) и в двухъямном потенциале, воспроизводящем систему двух концентрических квантовых колец.

Таблица 3
 Оценочные характеристики ряда (13) в зависимости от числа используемых базисных функций и стартовой точки движения волнового пакета r_0 для напряженности магнитного поля $H = 5000$ Гс

$\max C_n ^2$	N	$r_0, \text{ нм}$					
		570	590	610	353	333	320
9		$C_6 = 0.852$	$C_8 = 0.523$	$C_8 = 0.581$	$C_3 = 0.310$	$C_5 = 0.372$	$C_5 = 0.359$
19		$C_6 = 0.752$	$C_8 = 0.340$	$C_{10} = 0.161$	$C_3 = 0.070$	$C_6 = 0.086$	$C_6 = 0.157$
29		$C_6 = 0.751$	$C_8 = 0.291$	$C_{10} = 0.132$	$C_3 = 0.070$	$C_8 = 0.133$	$C_{11} = 0.131$

d	N	$r_0, \text{ нм}$					
		570	590	610	353	333	320
9		0.10	0.18	0.15	0.2	0.51	0.75
19		8.0×10^{-3}	0.14	0.84	1.9×10^{-4}	0.161	0.342
29		2.3×10^{-9}	2.3×10^{-7}	1.6×10^{-4}	2.2×10^{-12}	4.2×10^{-5}	1.2×10^{-2}

При исследовании динамики волновых функций электронов двумерного квантового кольца отмечалось, что движение волнового пакета периодическое и существенно отличается в сильных и слабых магнитных полях [9]. Другим важным моментом является положение волнового пакета в конкретный момент времени относительно минимума эффективного потенциала: если расположить пакет в минимуме потенциала с нулевым импульсом, то положение центра пакета будет неизменно с течением времени [10] и будет происходить достаточно медленное расплывание пакета (в приводимых расчетах данный эффект не наблюдается из-за достаточно малых времен); при отклонении центра пакета от минимума потенциала наблюдается периодическая динамика. Особенности процесса колебаний предполагают, что при нахождении волнового пакета в точке поворота он будет обладать нулевой скоростью, а в минимуме потенциала — максимальной скоростью.

Основываясь на вышесказанном, можно смоделировать ряд ситуаций, демонстрирующих возможности управления положением волнового пакета с помощью магнитного поля, проиллюстрированных на рис. 9. Графики не содержат количественной информации. Дополнительно показано поведение волнового пакета без переключения поля на двух изображениях снизу. Расчеты производились для потенциала $V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0$. Параметры a_1, a_2 и V_0 такие же, как указано в разделе 2. Переключения для напряженности магнитного поля производились с 0 до 8000 Гс и обратно.

Для воспроизведения первых двух случаев достаточно просто изменить напряженность магнитного поля: минимум эффективного потенциала сместится и волновой пакет начнет колебательный процесс. При включении магнитного поля минимум эффективного потенциала смещается влево, при выключении магнитного поля — смещается вправо (рис. 1). Последние две ситуации требуют более точного подхода: необходимо знать момент, в который должно производиться переключение магнитного поля (в данных

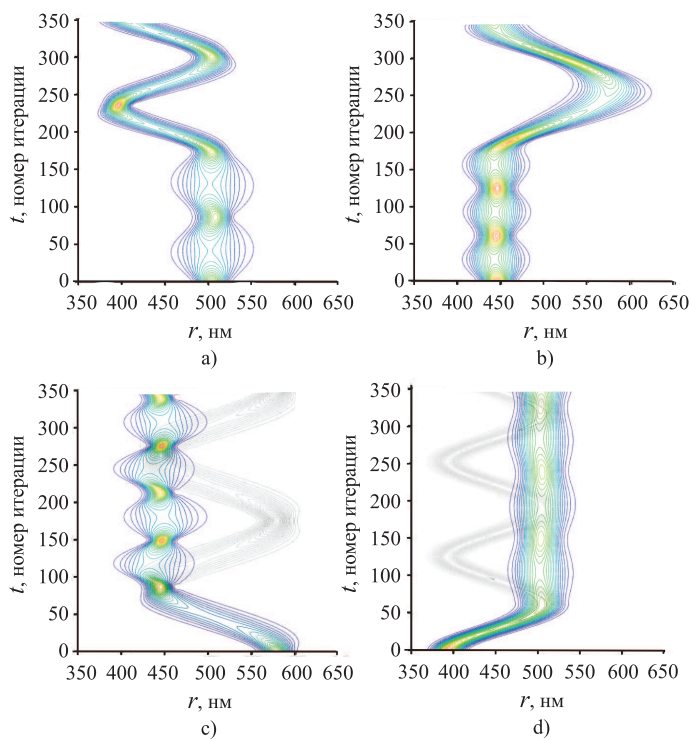


Рис. 9. Способы управления положением волнового пакета: перевод волнового пакета из “покоящегося” состояния в колебательное с помощью а) включения магнитного поля, б) выключения магнитного поля; перевод волнового пакета из колебательного состояния в “покоящееся” с помощью в) включения магнитного поля, г) выключения магнитного поля

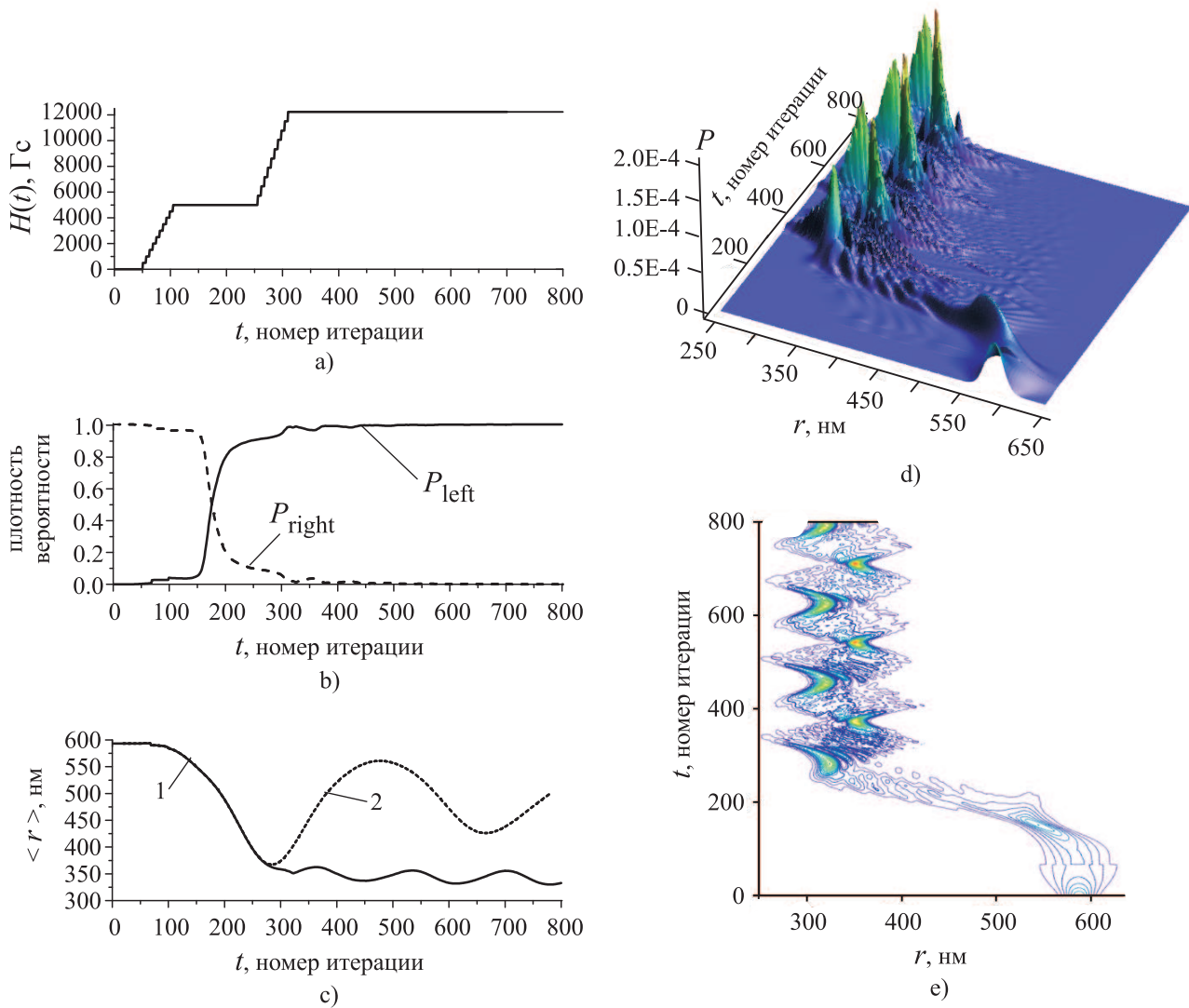


Рис. 10. Туннелирование волнового пакета из правой ямы в левую яму: а) изменение напряженности магнитного поля во времени $H(t)$, б) вероятности пребывания частицы в левой и правой части эффективного потенциала P_{left} и P_{right} соответственно, в) среднее значение радиуса волнового пакета $\langle r \rangle$ (1 — с включением магнитного поля, 2 — без включения магнитного поля), д) трехмерный график, е) линии уровней для плотности вероятностей

примерах предполагается, что напряженность магнитного поля изменяется мгновенно), и значение напряженности поля.

Переключение напряженности магнитного поля должно происходить в момент, когда волновой пакет обладает нулевой скоростью, т.е. находится в точке поворота. При этом необходимо, чтобы минимум эффективного потенциала (после переключения) совпал с точкой поворота в эффективном потенциале до переключения магнитного поля. Отсюда имеем два уравнения: $t_{\text{trick}} = t_0 + T/4$, где t_0 — начальный момент времени и T — период колебаний в потенциале до переключения поля, и $r_{02} = r_{01} + l$, где r_{01} — минимум эффективного потенциала до переключения магнитного поля, r_{02} — минимум эффективного потенциала после переключения магнитного поля и l — расстояние, которое проходит волновой пакет за время $T/4$.

Период колебаний связан с напряженностью поля через частоту колебаний, а значения r_{01} и r_{02} могут быть определены из условия $\frac{dU}{dr} = 0$. Величина l может быть оценена из предварительного расчета в ситуации, когда переключения поля не происходит. В сильном магнитном поле разница между соседними уровнями энергии значительно больше, чем в слабом магнитном поле. В связи с этим влияние нижней части потенциала становится менее значимым, поэтому определение координаты точки, относительно ко-

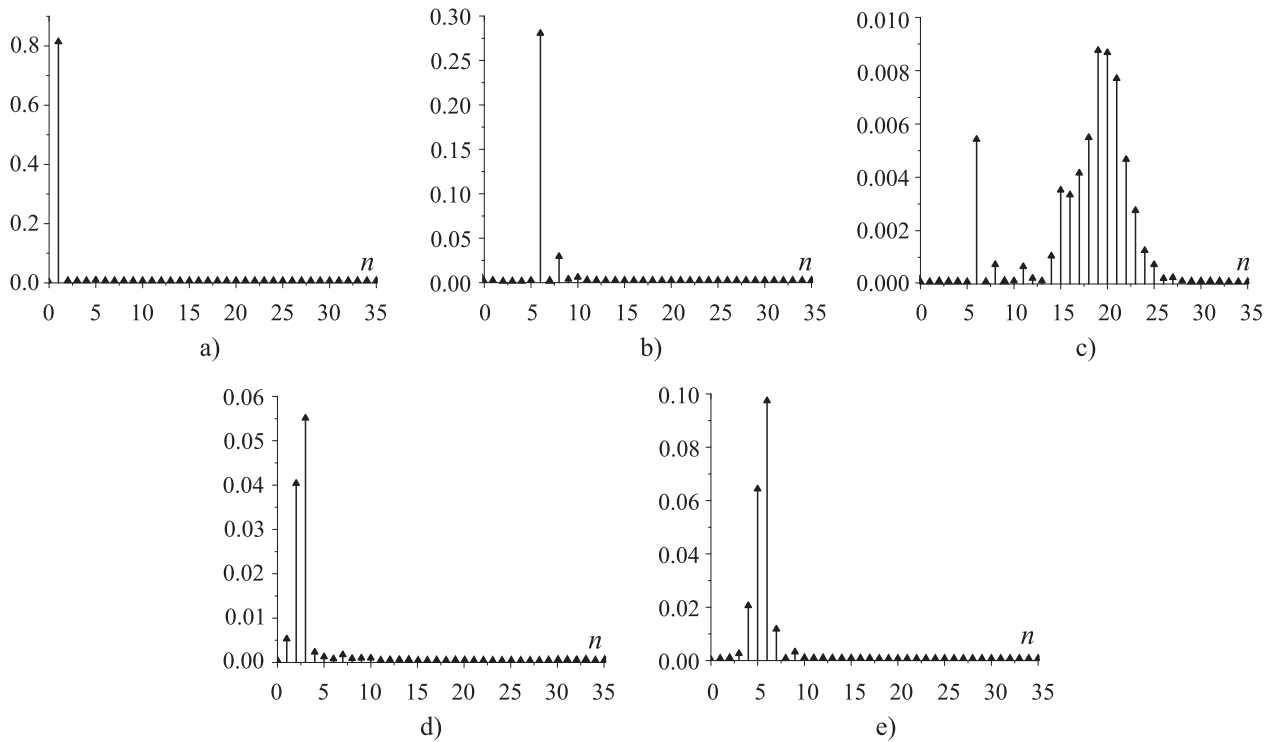


Рис. 11. Вклады спектральных коэффициентов C_n в сумму (13) в обозначенные временные интервалы для ситуации с переводом волнового пакета из правой части потенциала в левую: а) $t: 0-50, d = 1.3E - 19$; б) $t: 50-110, d = 4.3E - 13$; в) $t: 110-255, d = 9.1E - 6$; д) $t: 255-315, d = 3.2E - 3$; е) $t: 315-800, d = 3.0E - 7$

торой происходят колебания волнового пакета, также должно производиться из предварительного расчета без переключения магнитного поля.

Таким образом можно фиксировать и переводить волновой пакет в определенную точку пространства внутри отдельного квантового кольца.

6. Управление туннелированием в двухъямном потенциале с помощью магнитного поля. Динамика движения волнового пакета в двухъямном потенциале учитывает как поведение волнового пакета в эффективном потенциале каждой из ям, так и колебания в потенциале совокупной ямы. Это накладывает дополнительные сложности при управлении поведением волнового пакета. Кроме того, необходимо учитывать, что переключение напряженности магнитного поля не может происходить мгновенно, как это рассматривалось ранее. В связи с этим будем производить переключение поля в течение некоторого времени $dt = T_0/10$, где T_0 — период колебаний волнового пакета в совокупном потенциале, определяемый из предварительного расчета без переключения магнитного поля.

Следующие выводы описывают основные принципы, используемые при расчетах. Во-первых, согласно рис. 7 туннелирование из внешнего кольца предпочтительнее ввиду асимметрии эффективного потенциала. Во-вторых, отметим, что при нахождении волнового пакета в минимуме одной из ям туннелирование менее вероятно, чем при колебательном процессе, и чем больше амплитуда колебаний, тем больше шансов для туннелирования. В-третьих, исходя из сопоставления рисунков 1, можно заключить, что минимум эффективного потенциала при увеличении напряженности магнитного поля смещается влево по оси координат, а при снижении напряженности магнитного поля — вправо по оси координат. В-четвертых, заметим, что для “фиксации” волнового пакета необходимо, чтобы точка поворота совпала с минимумом эффективного потенциала после переключения магнитного поля.

Для практического применения результатов данной работы необходимо продемонстрировать два режима:

- 1) перевод электрона из внешнего кольца во внутреннее с “фиксацией”,
- 2) перевод электрона из внутреннего кольца во внешнее с “фиксацией”, что гораздо сложнее, учитывая исходные особенности системы.

Первый случай продемонстрирован на рис. 10. Для показанного расчета выбран шаг $\tau = \frac{T}{2 \times 350}$,

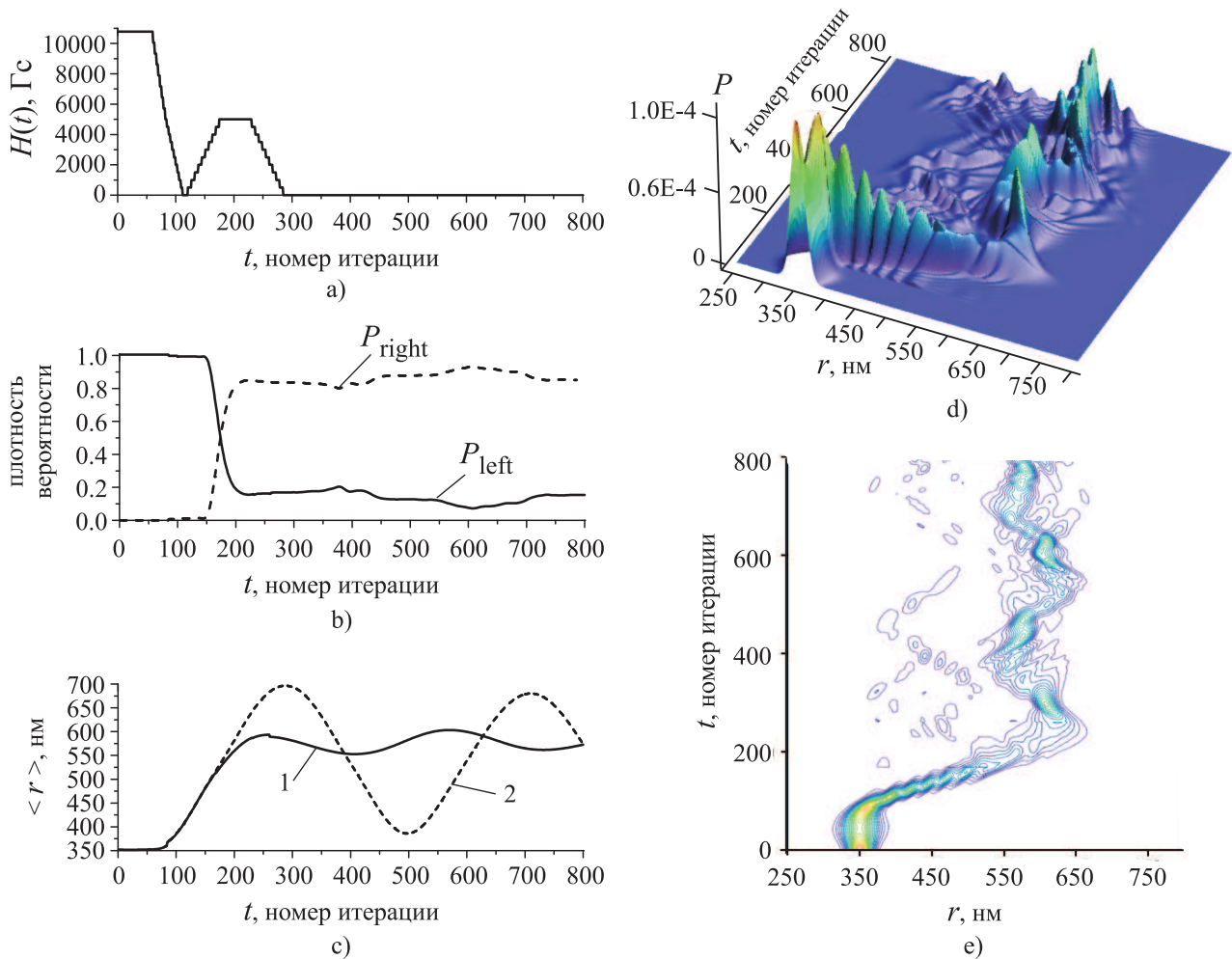


Рис. 12. Туннелирование волнового пакета из правой ямы в левую яму: а) изменение напряженности магнитного поля во времени $H(t)$, б) вероятности пребывания частицы в левой и правой части эффективного потенциала P_{left} и P_{right} , соответственно, в) среднее значение радиуса волнового пакета $\langle r \rangle$ (1 — с включением магнитного поля, 2 — без включением магнитного поля), д) трехмерный график, е) линии уровней для плотности вероятностей

где $T = \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}}$ — период колебаний волнового пакета в эффективном потенциале $U(r)$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}$, $\omega_c = \frac{e \times 12230 \text{ Гс}}{\mu}$. При увеличении напряженности магнитного поля до величины 5000 Гс (номера итераций 50–110 — наращивание напряженности H) волновой пакет выводится из равновесного состояния и начинает движение из внешнего кольца. После туннелирования во внутреннее кольцо (время туннелирования — итерации 150–200) магнитное поле наращивается повторно до величины 12 200 Гс (номера итераций 255–315 — повторное наращивание H), чтобы не произошло обратного туннелирования. В подобной ситуации эффективный потенциал изменяется таким образом, что внешняя часть не имеет минимума, а значит, и барьера как такового нет (рис. 1) — электрон остается во внутреннем кольце (итерации 315–800 — переключений поля больше не происходит).

Как отмечалось ранее, необходимо соблюдать контроль точности вычислений при расчетах с переключением магнитного поля. Спектральные коэффициенты C_n зависят от времени; если для вычислений с постоянным значением напряженности их вклады в сумму (13) практически не изменяются, то зависимость от времени в данном расчете весьма существенна. На рис. 11 показаны вклады коэффициентов C_n в последовательные временные интервалы. Как видно из рисунка, для отрезка времени 255–315, соответствующего переключению магнитного поля с 5000 Гс до 12 200 Гс, величина d , определяемая в (14), имеет максимальное значение 3.0×10^{-3} , которое характеризует возможную нехватку базисных функций.

Рассмотрим обратную ситуацию: туннелирование из внутреннего кольца во внешнее. В этом случае

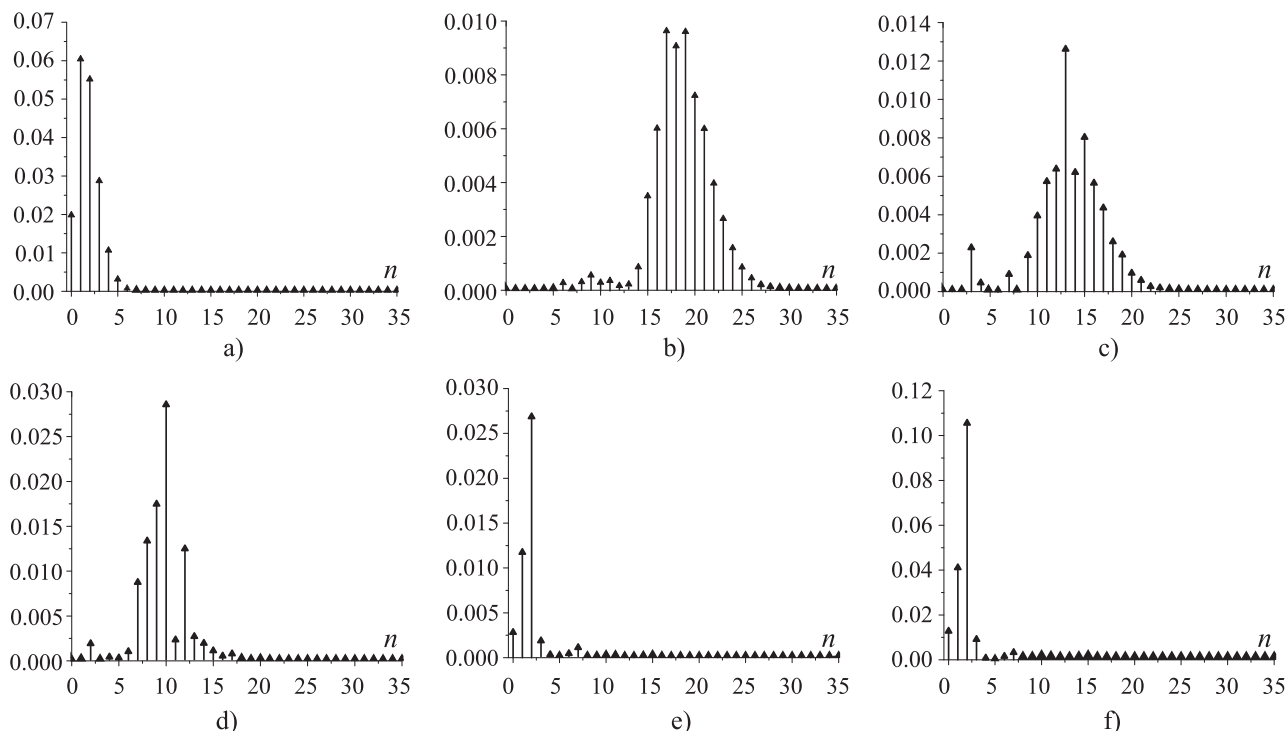


Рис. 13. Вклады спектральных коэффициентов C_n в сумму (13) в обозначенные временные интервалы для ситуации с переводом волнового пакета из левой части потенциала в правую: а) $t: 0-60, d = 5.6E - 26$; б) $t: 60-120, d = 1.0E - 5$; в) $t: 120-180, d = 1.0E - 9$; д) $t: 180-230, d = 1.7E - 10$; е) $t: 230-290, d = 1.2E - 7$; ф) $t: 290-800, d = 8.6E - 8$

необходимо снижать значение напряженности магнитного поля. Предварительные результаты показали, что переключение с 12 200 Гс до 0 Гс разгоняет волновой пакет достаточно, чтобы преодолеть барьер с большой вероятностью (итерации 60–114 — выключение магнитного поля). Однако через некоторое время основная часть пакета туннелирует обратно (см. приведенную на рис. 10 зависимость для среднего значения координаты $\langle r \rangle$). Для того чтобы зафиксировать основную часть пакета во внешней части эффективного потенциала, необходимо произвести дополнительное включение поля в момент туннелирования (итерации 120–180 — включение магнитного поля до величины 5000 Гс) с целью сместить минимум эффективного потенциала влево по оси r , а затем при достижении точки поворота снова выключить магнитное поле (итерации 230–290 — выключение магнитного поля). Результат показан на рис. 12. Шаг τ определяется так же, как и в предыдущем случае. Аналогичного эффекта можно было бы добиться двумя последовательными снижениями величины магнитного поля, однако тогда перепад поля должен был быть гораздо более значительным для преодоления барьера между кольцами, что означало бы использование магнитных полей напряженностью порядка 10^5 Гс, а это существенно более сложный технический уровень реализации.

Вклады спектральных коэффициентов C_n в сумму (13) для данного расчета приведены на рис. 13. Снова наиболее существенные проблемы возникают при переключении магнитного поля (итерации по времени 60–120), при этом значение напряженности меняется с 10 784 Гс до 0 Гс. Тем не менее, величина $d = 10^{-5}$ оказывается приемлемой и можно говорить о высокой точности произведенного расчета.

Комбинация описанных режимов позволяет производить управляемый перевод волнового пакета из одного кольца в другое и обратно, воспроизводя, таким образом, работу квантового устройства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Razavy M.* Quantum theory of tunneling. Singapore: World Scientific, 2003.
2. *Гольданский В.И., Трахтенберг Л.И., Флеров В.Н.* Туннельные явления в химической физике. М.: Наука, 1986.
3. *Kuroda T., Mano T., Ochiai T., Sanguinetti S., Sakoda K., Kido G., Koguchi N.* Optical transitions in quantum ring complexes // Phys. Rev. B. 2005. **72**. 205–301.
4. *Mano T., Kuroda T., Sanguinetti S., Ochiai T., Tateno T., Kim J., Noda T., Kawabe M., Sakoda K., Kido G., Koguchi N.* Self-assembly of concentric quantum double rings // Nano Letters. 2005. **5**, N 3. 425–428.

5. *Sanguinetti S., Abbarchi M., Vinattieri A., Zamfirescu M., Gurioli M., Mano T., Kuroda T., Koguchi N.* Carrier dynamics in individual concentric quantum rings: photoluminescence measurements // *Phys. Rev. B.* 2008. **77**. 125–404.
6. *Волкова Е.А., Попов А.М., Рахимов А.Т.* Квантовая механика на персональном компьютере. М.: Едиториал, 1995.
7. *Ковеня В.М., Яценко Н.Н.* Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, 1981.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
9. *Брызгалов А.А., Карманов Ф.И.* Метод расщепления по физическим факторам в задаче о временной динамике волновых функций электронов двумерного квантового кольца // *Матем. моделирование.* 2010. **22**, № 6. 15–26.
10. *Брызгалов А.А., Карманов Ф.И.* Двумерное квантовое кольцо: влияние магнитного поля на временную динамику волновых функций электронов // *Изв. вузов. Физика.* 2010. **53**, № 3/2. 31–36.
11. *Горбачевич А.А., Капаев В.В., Конаев Ю.В.* Управляемая эволюция электронных состояний в наноструктурах // *Журн. exper. и теор. физ.* 1995. **7**, № 4. 1320–1349.
12. *Avishai Y., Hatsugai Y., Kohmoto M.* Persistent currents and edge states in magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 1993. **47**. 9501–9512.
13. *Tan W.-C., Inkson J.C.* Electron states in two-dimensional ring — an exactly soluble model // *Semicond. Sci. Technol.* 1996. **11**. 1635–1641.
14. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
15. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. М.: Наука, 1980.
16. *Айдагулов Г.Р.* Метод подвижной сетки для решения нестационарного уравнения Шредингера // *Вычислительные методы и программирование.* 2004. **5**, № 1. 22–34.
17. *Штыгашев А.А.* Распад стационарного состояния в решетке дельта-барьеров // *Матем. моделирование.* 2009. **21**, № 5. 67–76.

Поступила в редакцию
13.04.2011
