УДК 517.938

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ИСКРИВЛЕННЫХ СЛОИСТЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

М.И. Гаврилов, И.Ю. Попов, С.И. Попов

Рассмотрена многочастичная задача в искривленном квантовом волноводе (слое). Описан метод оценки сдвига двухчастичного уровня в искривлении по отношению к одночастичному.

Ключевые слова: слой, наноструктура, волновод, водород, частица, собственная функция.

Введение

Известно, что искривленные квантовые слои способны удерживать частицы. Это связано с тем, что соответствующий гамильтониан имеет непустой дискретный спектр. При этом увеличение кривизны ведет к увеличению мощности множества точек дискретного спектра. Вопрос о количестве частиц, которые могут быть удержаны в искривлении волновода (слоя) или его границы, важен для многих физических приложений. В частности, для реализации двухкубитовой операции в квантовом компьютере на связанных волноводах необходимо удержание в некоторой области двух электронов в течение времени выполнения операции. Другое возможное применение связано с проблемой хранения водорода в нанослоистых структурах. Факт наличия связанных состояний в искривленных наноструктурах может быть использован для увеличения количества водорода, хранящегося в межслоевом пространстве. При этом количество связанных состояний зависит от кривизны. Заметим, что гамильтониан плоского бесконечного слоя не имеет связанных состояний.

Оценка числа связанных состояний

Будем действовать аналогично [1]. Чтобы оценить количество нейтральных частиц (фермионов), которые могут находиться в связанном состоянии в окрестности искривленной части слоя, достаточно найти размерность подпространства дискретного спектра для одночастичного гамильтониана и воспользоваться принципом Паули. Если слой переходит в себя при сдвиге вдоль одной из осей, то задача сводится к двумерной (задача об искривленной полосе). Рассмотрим именно этот случай. Пусть Σ – полоса в $\mathbb{R}^2$ постоянной ширины $d = 2a$. Пусть Γ – ось Σ . С точностью до евклидова преобразования полоса однозначно задается полушириной a и кривизной $s \to \gamma(s)$, заданной на Γ, где s – длина кривой. Будем предполагать, что выполнены следующие условия регулярности а) Σ несамопересекающаяся; б) $a\|\gamma\|_\infty < 1$, в) γ финитна и $\gamma \in C^2$, γ', γ' – ограничены.

Пусть $\hbar = 2m = 1$. Используя естественные ортогональные координаты (s,u) в Σ, сводим одночастичный гамильтониан к оператору

$$H = -\partial_s \left(1+u\gamma\right)^{-2} \partial_s - \partial_u{}^2 + V\left(s,u\right)$$

на $L^2(\mathbb{R}\times(-a,a))$ с потенциалом

$$V\left(s,u\right) = -\frac{\gamma\left(s\right)^2}{4\left(1+u\gamma\left(s\right)\right)^2} + \frac{u\gamma''\left(s\right)}{2\left(1+u\gamma\left(s\right)\right)^3} - \frac{5u\gamma''\left(s\right)^2}{4\left(1+u\gamma\left(s\right)\right)^4},$$

который определен и существенно самосопряжен на $D(H)=\left\{ f: f\in C^{\infty}, f(s,\pm a)=0, Hf\in L^{2}\right\}$. Представляя оператор в виде разложения по модам, сводим задачу к одномерной [2–4]. Здесь используем оценки Бирмана–Швингера. Мажорируем потенциал V:

$$W=\frac{\gamma(s)^{2}}{4\delta_{-}^{2}}+c\frac{a|\gamma''(s)|}{2\delta_{-}^{3}}+\frac{5a^{2}\gamma''(s)^{2}}{4\delta_{-}^{4}},\quad \delta_{\pm}=1\pm a\|\gamma_{\infty}\|.$$

Пусть для $j=2,3\ldots$

$$W_{j}(s)=\begin{cases}0, & \left(\frac{\pi}{2a}\right)^{2}\left(j^{2}-1\right)>\|W\|_{\infty},\\ W(s), & \left(\frac{\pi}{2a}\right)^{2}\left(j^{2}-1\right)\le\|W\|_{\infty}.\end{cases}$$

Тогда количество N нейтральных частиц с полуцелыми спинами S, которые могут быть удержаны в связанном состоянии в окрестности искривления слоя, оценивается [1] следующим образом:

$$N\le(2S+1)\left(1+\delta_{+}^{2}\frac{\int_{\mathbb{R}^{2}}W(s)|s-t|W(t)dsdt}{\int_{\mathbb{R}}W(s)ds}+\sum_{j=2}^{\infty}\delta_{+}^{2}\int_{\mathbb{R}}W(s)ds\right).$$

Здесь границы слоя предполагались непроницаемыми (граничное условие Дирихле). В рамках такого же подхода можно анализировать и другие условия. В частности, полупрозрачную границу можно рассматривать как дельта-потенциал, сосредоточенный на кривой (см., например, [5]).

В случае заряженных частиц (протонов) необходимо учитывать их взаимодействие друг с другом (отталкивание). При этом возможна ситуация, когда дискретный спектр оказывается пуст. А именно, N-частичный гамильтониан данной системы имеет пустой дискретный спектр, если

$$T_{\beta}(N)+\frac{e^{2}N(N-1)}{2\beta\sqrt{7}}\ge\|W\|_{\infty}N+\left(\frac{\pi}{2a}\right)^{2}N+\frac{e^{2}}{18\beta\sqrt{2}}$$

для некоторого $\beta\ge\max\left\{2b,596e^{-2}\right\}$, где $2b$ – диаметр носителя функции γ; e – заряд частицы,

$$T_{\beta}(N)=\begin{cases}2\sum_{m=1}^{n}\lambda_{m}, & N=2n,\\ 2\sum_{m=1}^{n}\lambda_{m}+\lambda_{m}, & N=2n+1,\end{cases}$$

λ_{m} – упорядоченные собственные значения лапласиана Дирихле для области

$$\left[-\frac{3}{2}\beta\delta_{+},\frac{3}{2}\beta\delta_{+}\right]\times[-a,a].$$

Двухчастичная задача в волноводе с искажением границы

Задачу о двух взаимодействующих частицах в двумерном волноводе с искажением границы будем решать методом Хартри. Соответствующая одночастичная задача рассмотрена в [6] в рамках вариационного подхода. Рассматриваемая область задается следующим образом:

$$\Omega=\left\{(x,y)\in R^{2}:0<y<a\left(1+\lambda f(x)\right)\right\},\quad \operatorname{supp}f=[-b,b],\ f\in C_{0}^{\infty}(R).$$

Пробную функцию, которую можно считать приближением собственной функции, находим в виде

$$\Psi=\begin{cases}\left(1+\lambda\eta f(x)\right)\chi_{1}(y), & |x|\le b,\\ e^{-h|x\mp b|}\chi_{1}(y), & \pm x>b.\end{cases}\qquad(1)$$

Здесь

$$z=\frac{\pi^{2}}{a^{2}}\frac{\|f\|^{2}}{\|f'\|^{2}},$$

η выбираем из условия $\eta^{2}-2\eta z+3z+K^{2}<0,\ K=\sqrt{\sum_{n=2}^{\infty}\left(\frac{2n}{n^{2}-1}\right)}=\sqrt{\frac{\pi^{2}}{3}+\frac{1}{4}}$, которое может быть выполнено, если $z^{2}-3z-K^{2}>0$, в частности, при выполнении этого условия можно взять $\eta=z$, что соответствует минимуму параболы

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n y}{a},$$

$$h = \frac{1}{2}\lambda^2 d_1 \|f\|^2, \; d_1 = \frac{\pi^2}{a^2 z}\left(z^2 - 3z - K^2\right).$$

Оценка расстояния связанного состояния от границы непрерывного спектра дается неравенствами

$$-\lambda^4 d_0^{\,2} \|f\|^4 + O\left(\lambda^5\right) \le E - \frac{\pi^2}{a^2} \le -\frac{1}{4}\lambda^4 d_1^{\,2} \|f\|^4 + O\left(\lambda^5\right),$$

$$d_0 = \left(\frac{4\pi b}{a^2}\right)^2 - 3\frac{\pi^2}{a^2}.$$

Решение соответствующей двухчастичной задачи ищем методом самосогласованного поля в виде

$$\Psi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\right) = \Psi_1\left(\mathbf{r}_1\right)\Psi_2\left(\mathbf{r}_2\right), \qquad (2)$$

где Ψ_1 –одночастичная функция, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – радиус-векторы частиц. Предполагается, что в невозмущенном состоянии (без взаимодействия) обе частицы находятся в одинаковом состоянии, приближение для которого описано выше. Для определения функции Ψ_1 метод Хартри приводит к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1\left(\mathbf{r}_1\right) + U\left(\mathbf{r}_1\right)\Psi_1\left(\mathbf{r}_1\right) = E_1\Psi_1\left(\mathbf{r}_1\right), \qquad (3)$$

$$U\left(\mathbf{r}_1\right) = \int_\Omega \left|\Psi_1\left(\mathbf{r}_2\right)\right|^2 \frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right|} dV_2. \qquad (4)$$

Алгоритм решения таков. В качестве нулевого приближения выбираем построенное приближение для одночастичной собственной функции, подставляем его в (4) и решаем задачу (3) с полученным потенциалом. Найденное решение подставляем в (3) и повторяем процедуру. Выполнение алгоритма продолжаем до тех пор, пока с выбранной точностью значения E_1 на последовательных шагах не начнут повторяться.

Заключение

Предложен способ оценки количества частиц, которые могут удерживаться искривлением границы волновода. В частности, для волновода с локальным искажением границы предложена методика оценки сдвига двухчастичного по отношению к одночастичному. Отталкивание частиц приводит к повышению уровня. Если же двухчастичный уровень будет выше границы непрерывного спектра, то это означает, что две частицы не могут быть удержаны данным искривлением. Параметры сдвига уровня зависят от характеристик искривления границы.

Литература

1. Exner P., Vugalter S.A. On the number of particles that a curved quantum waveguide can bind // J. Math. Phys. – 1999. – V. 40. – P. 4630–4638.
2. Seto N. Bargmann's inequalities in spaces of arbitrary dimension // Publ. RIMS. – 1974. – V. 9. – P. 429–461.
3. Klaus M. On the bound state of Schrodinger operators in one dimension // Ann. Phys (Leipzig). – 1977. – V. 108. – P. 288–300.
4. Newton R.G. Bounds for the number of bound states for Schrodinger equation in one and two dimensions // J. Operator Theory. – 1983. – V. 10. – P. 119–125.
5. Лобанов И.С., Лоторейчик В.Ю., Попов И.Ю. Оценка снизу спектра двумерного оператора Шредингера с δ-потенциалом на кривой // ТМФ. – 2010. – Т. 162 (3). – С. 397–407.
6. Exner P., Vugalter S.A. Bound states in a locally deformed waveguide: critical case // Lett. Math. Phys. – 1997. – V. 39. – P. 59–68.

Гаврилов Максим Иванович – Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, аспирант, maxim.gavrilov@gmail.com

Попов Игорь Юрьевич – Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой, popov@mail.ifmo.ru

Попов Сергей Игоревич – Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, студент, Serezha.popov@gmail.com