

Граничные условия и эффективные потенциалы в квантовых системах.

Эль Хадж Дау Карим

Москва, 2017

Введение

В работах:

[1] **Wethekam S. Valdes D. , Monreal R. C. Winter H.** Phys. Rev. B. 78:75423, 2008;

[2] **Monreal R. C. Goebel D. Primetzhofer D. Bauer P.** Nucl. Instr. B. 315, p.206, 2013;

исследовалось рассеяние Н и He на поверхностях Ag, Au и Al и был обнаружен потенциал притяжения, обладающий минимумом.

Суть эксперимента

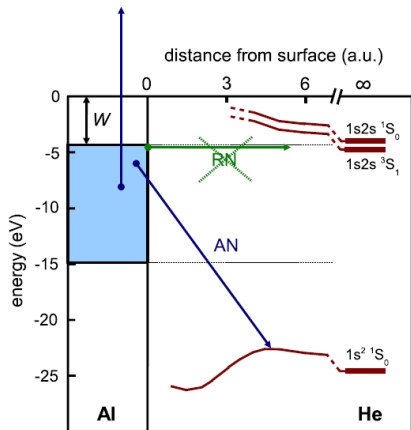


Рис. 1: Энергетическая диаграмма взаимодействия *He* с *Al* поверхность

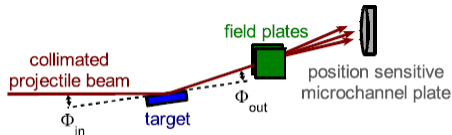
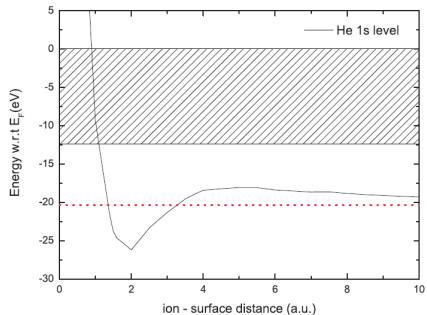
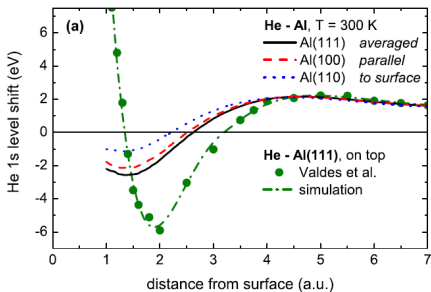


Рис. 2: Схема экспериментальной установки.

Результаты экспериментов



Цели

Цели работы:

- Построение эффективного потенциала для квантовой системы одиночного водородоподобного атома над поверхностью;

Цели

Цели работы:

- Построение эффективного потенциала для квантовой системы одиночного водородоподобного атома над поверхностью;
- Поиск решения, соответствующего основному состоянию атома.

Модельные предположения

В данной работе моделируется квантовая система, состоящая из одиночного водородоподобного атома левитирующего над поверхностью, при этом используются следующие модельные предположения:

Модельные предположения

В данной работе моделируется квантовая система, состоящая из одиночного водородоподобного атома левитирующего над поверхностью, при этом используются следующие модельные предположения:

- Приближение Борна – Оппенгеймера. Полагаем, что ядро закреплено (приближение бесконечно тяжелого ядра). Тогда мы можем положить ядро в начало координат и решать уравнение Шредингера для свободного электрона в электростатическом поле

$$-\left(\frac{1}{2}\right) \Delta \psi(r) + U(r) \psi(r) = E \psi(r), \quad (1)$$

$$U(r) = \frac{1}{r}.$$

Модельные предположения

- Взаимодействие электрона с поверхностью будем моделировать с помощью граничных условий 3-его рода. Поверхностные эффекты (или пленку из оксидов) можно описать узким потенциалом, который будем моделировать δ – функцией, что и соответствует граничным условиям 3-его рода:

$$\vec{\nabla}\psi + \lambda\psi = 0. \quad (2)$$

Вариационный метод Ритца

- Краевую задачу (1) – (2) можем свести в вариационной задаче, рассматривая функционал

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} |\psi|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3)$$

экстремум которого будем искать методом Ритца.

Итак,

- нам нужно найти минимум функционала

$$E = \frac{\int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}\psi \right)^2 + U\psi^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \psi^2}{\int d^3\vec{r} \psi^2}; \quad (4)$$

Итак,

- нам нужно найти минимум функционала

$$E = \frac{\int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}\psi \right)^2 + U\psi^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \psi^2}{\int d^3\vec{r} \psi^2}; \quad (4)$$

- Так как наша квантовая система обладает цилиндрической симметрией, выбор цилиндрических координат позволяет нам проводить интегрирование лишь по двум координатам ρ и z , используя метод трапеции на сетке;

Итак,

- нам нужно найти минимум функционала

$$E = \frac{\int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}\psi \right)^2 + U\psi^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \psi^2}{\int d^3\vec{r} \psi^2}; \quad (4)$$

- Так как наша квантовая система обладает цилиндрической симметрией, выбор цилиндрических координат позволяет нам проводить интегрирование лишь по двум координатам ρ и z , используя метод трапеции на сетке;
- Начальное приближение волновой функции возьмем как e^{-r} , где $r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$, которое удовлетворяет естественным граничным условиям (убывает как экспонента на бесконечности);

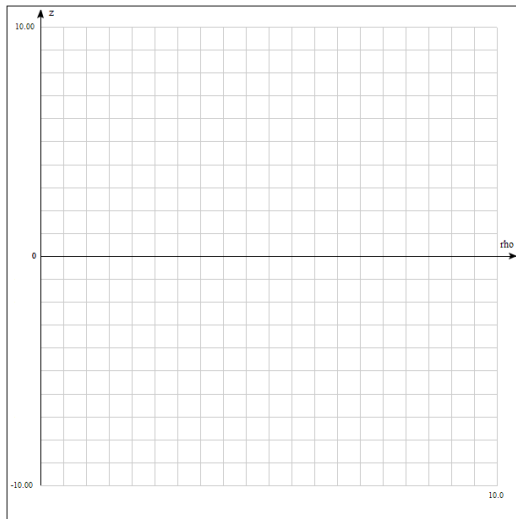
Итак,

- нам нужно найти минимум функционала

$$E = \frac{\int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}\psi \right)^2 + U\psi^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \psi^2}{\int d^3\vec{r} \psi^2}; \quad (4)$$

- Так как наша квантовая система обладает цилиндрической симметрией, выбор цилиндрических координат позволяет нам проводить интегрирование лишь по двум координатам ρ и z , используя метод трапеции на сетке;
- Начальное приближение волновой функции возьмем как e^{-r} , где $r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$, которое удовлетворяет естественным граничным условиям (убывает как экспонента на бесконечности);
- Эффективную бесконечность положим на расстоянии 10, что задает размер нашей сетки.

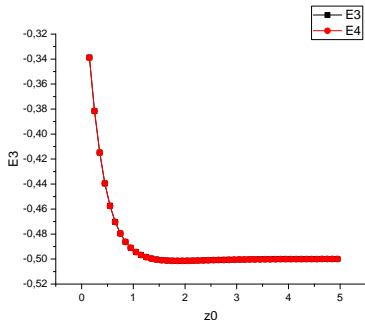
Програмное представление квантовой системы



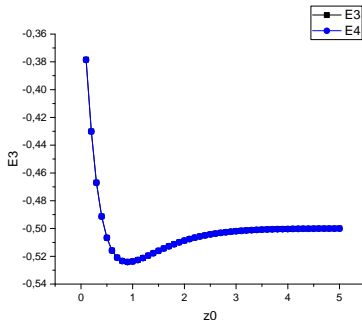
Итоги работы

- Далее приведены графики зависимости энергии атома от расстояния между атомом и плоскостью для различных значений коэффициента λ

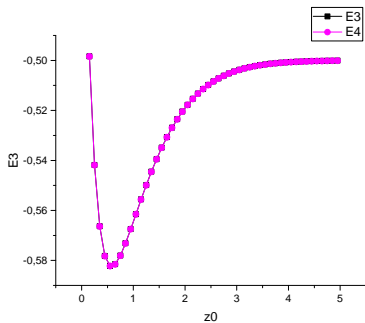
$\lambda = 0.75$



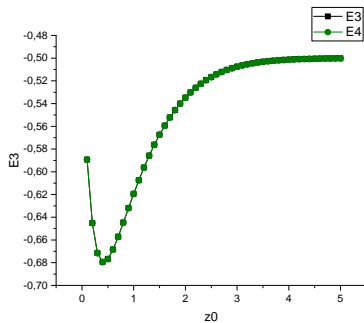
$\lambda = 0.5$



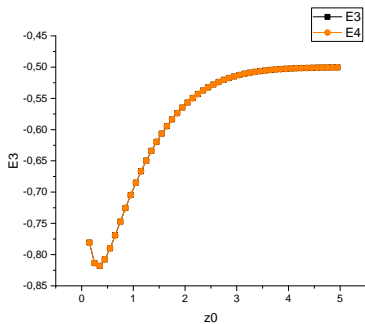
$\lambda = 0.25$



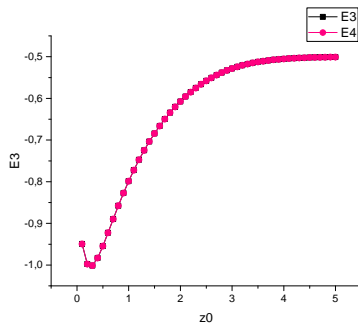
$\lambda = 0$



$$\lambda = -0.25$$



$$\lambda = -0.5$$



Выводы

Полученные результаты:

- Найдена зависимость энергии атома от расстояния до плоскости;

Выводы

Полученные результаты:

- Найдена зависимость энергии атома от расстояния до плоскости;
- Найдены минимальные значения энергии атома и соответствующие им положения атома относительно плоскости;

Выводы

Полученные результаты:

- Найдена зависимость энергии атома от расстояния до плоскости;
- Найдены минимальные значения энергии атома и соответствующие им положения атома относительно плоскости;
- Проанализирована зависимость от граничных условий (коэффициента λ);

Выводы

Полученные результаты:

- Найдена зависимость энергии атома от расстояния до плоскости;
- Найдены минимальные значения энергии атома и соответствующие им положения атома относительно плоскости;
- Проанализирована зависимость от граничных условий (коэффициента λ);

Результаты данной работы указывают на возможность конструирования квантовых ловушек довольно простым и малозатратным способом.

Спасибо за внимание!