

# ВЛИЯНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ТРЕТЬЕГО РОДА НА ПОВЕДЕНИЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

**Эль Хадж Дау Карим Ибрахимович**

МГУ им. М.В. Ломоносова  
Физический факультет  
Каф. квантовой теории и физики высоких энергий

Научный руководитель:  
профессор Силаев Пётр Константинович

Москва, 2019

Исследование свойств квантовых систем, движение которых ограничено в пространстве (заключенных в полости или движущихся в полуограниченном пространстве) вызывает большой интерес, так как они используются во многих отраслях:

- Для анализа влияния давления на уровни энергии и поляризуемость атомов;
- В качестве ячеечной модели в жидком состоянии;
- В полупроводниковых точках;
- В атомах, заключенных в фуллерене;
- В астрофизике для анализа соотношения масса-радиус белых карликов и свойств ионизированной плазмы.

Исследование электронного взаимодействия атомов и ионов с твердой поверхностью необходимо для различного рода приложений таких как:

- Средства анализа поверхностей;
- Детектирование частиц;
- Взаимодействие плазмы со стенками;
- Катализ.

# Суть эксперимента

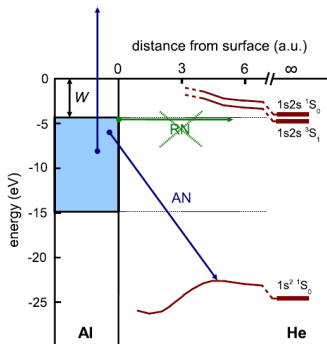


Рис. 1: Энергетическая диаграмма взаимодействия *He* с алюминиевой поверхностью

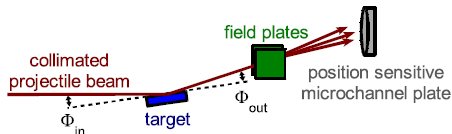
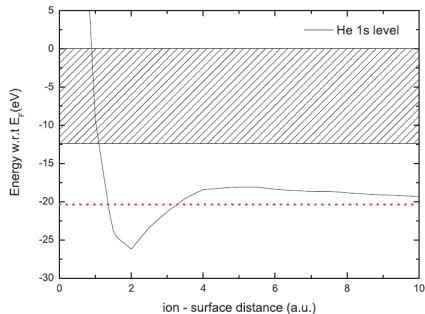
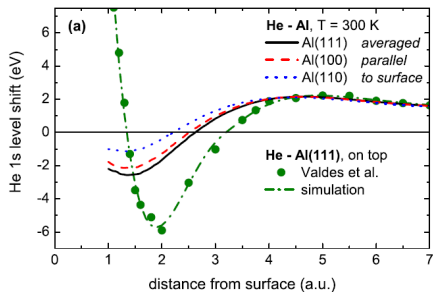


Рис. 2: Схема экспериментальной установки.

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

Monreal R. C. Goebel D. Primetzhof D. Bauer P. Nucl. Instr. B. 315, p.206, 2013.

# Результаты экспериментов



## Цели работы:

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

## Цели работы:

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

## Цели работы:

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



## Цели работы:

- Построение эффективного потенциала для квантовой системы одиночного водородоподобного атома над поверхностью;
- Поиск решения, соответствующего основному состоянию атома;
- Построение эффективного потенциала для квантовой системы с двумя ядрами над поверхностью;
- Изучение поведения волновой функции электрона для различных значений параметров квантовой системы;

## Цели работы:

- Построение эффективного потенциала для квантовой системы одиночного водородоподобного атома над поверхностью;
- Поиск решения, соответствующего основному состоянию атома;
- Построение эффективного потенциала для квантовой системы с двумя ядрами над поверхностью;
- Изучение поведения волновой функции электрона для различных значений параметров квантовой системы;
- Получение зависимости равновесного межъядерного расстояния от параметров квантовой системы.

# Модельные предположения

В данной работе моделируется квантовая система, состоящая из одиночного водородоподобного атома (а также и двух ядер) расположенного над поверхностью, при этом используются следующие модельные предположения:

# Модельные предположения

В данной работе моделируется квантовая система, состоящая из одиночного водородоподобного атома (а также и двух ядер) расположенного 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

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

$$U(r) = -\frac{1}{r};$$

В случае двух ядер:

$$U(r) = -\left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{A}|} + \frac{1}{|\vec{r} + \vec{A}|}\right).$$

- Взаимодействие электрона с поверхностью будем моделировать с помощью граничных условий 3-его рода. Поверхностные эффекты можно описать узким потенциалом, который будем моделировать  $\delta$  – функцией, что и соответствует граничным условиям 3-его рода:

$$\nabla_n \psi + \lambda \psi = 0. \quad (2)$$

- 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  $\rho$  и  $z$ , используя метод трапеции на сетке;



Итак,

- нам нужно найти минимум функционала

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

- Так как наша квантовая система обладает цилиндрической симметрией, выбор цилиндрических координат позволяет нам проводить интегрирование лишь по двум координатам  $\rho$  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

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

- Так как наша квантовая система обладает цилиндрической симметрией, выбор цилиндрических координат позволяет нам проводить интегрирование лишь по двум координатам  $\rho$  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.

При выборе начального приближения в виде  $e^{-r}$ , производная в окрестности ядра не существует и, следовательно, разностное дифференцирование на узле, который совпадает с точкой, в которую помещено ядро, будет неправильным.

Будем искать волновую функцию в виде

$$\Psi = C_0\psi_0 + \psi_1, \quad (5)$$

где

$$\psi_0 = e^{-r}, \quad (6)$$

$$\psi_1(\vec{0}) = 0. \quad (7)$$

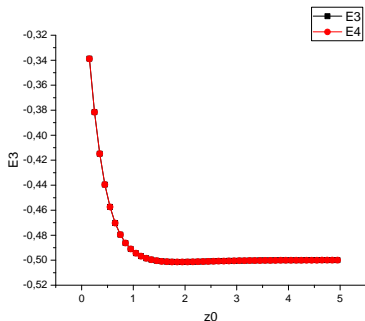
$\psi_1$  можно инициализировать как

$$\psi_1 = re^{-r^2}$$

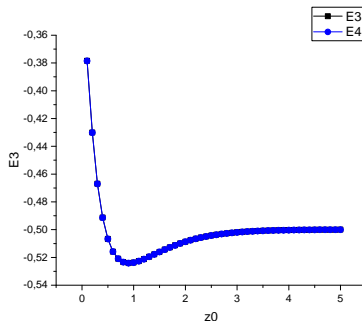
и при такой инициализации  $\psi_1$  будет удовлетворять условию (7) и обеспечивать необходимую скорость убывания на бесконечности.

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

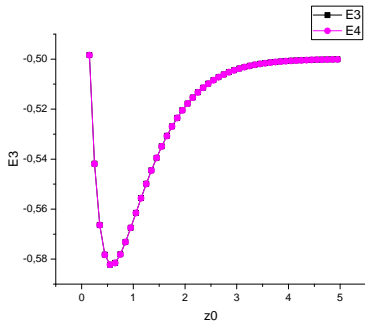
$\lambda = 0.75$



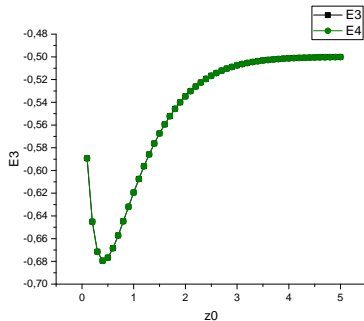
$\lambda = 0.5$



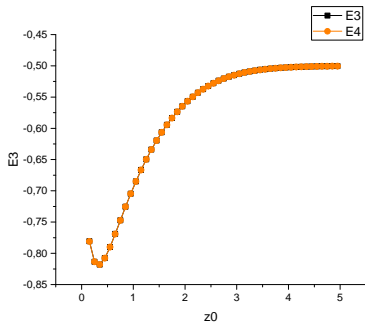
$\lambda = 0.25$



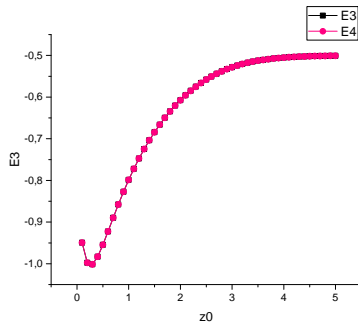
$\lambda = 0$



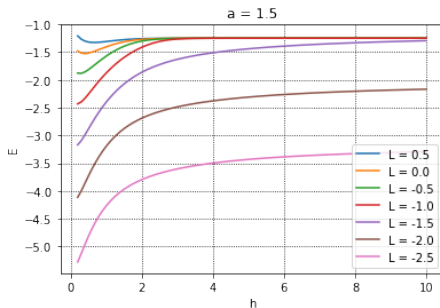
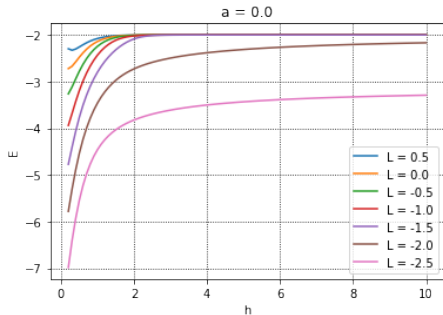
$$\lambda = -0.25$$

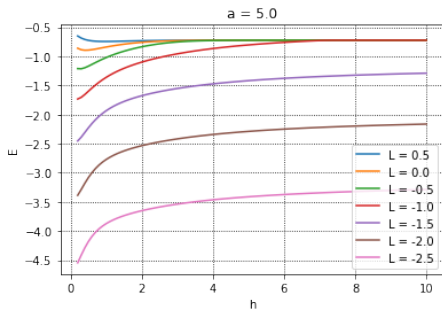
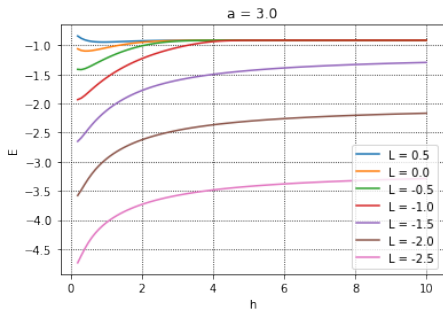


$$\lambda = -0.5$$



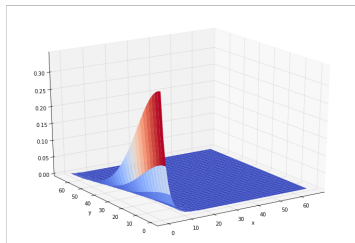
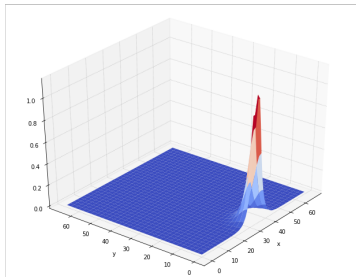
- Далее приведены профили эффективных потенциалов для различных значений  $\lambda$  при фиксированных межъядерных расстояниях  $a$  и  $\lambda = -0.5$







- Профили волновой функции электрона при  $\lambda = -1.5$ ,  $h = 10$ ,  $a = 1.0$  и  $a = 1.5$  соответственно.



$h$	10	7	6	5	4	3
$a_0$	2.0025	2.0025	2.0027	2.0031	2.00771	2.16827
$E$	-0.60261	-0.60261	-0.60261	-0.60265	-0.60322	-0.61078

$h$	2	1	0.7	0.5	0.3	0.2
$a_0$	2.42613	1.96587	1.63333	1.42092	1.35165	1.23213
$E$	-0.67976	-0.92597	-1.05425	-1.15228	-1.22532	-1.22241

**Таблица 1:** Равновесные межъядерные расстояния при различных расстояниях между ядрами и плоскостью и соответствующие значения энергии с учетом отталкивания ядер для  $\lambda = -0.5$

## Полученные результаты:

- Найдена зависимость энергии атома от расстояния до плоскости;

## Полученные результаты:

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

## 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  $\lambda$ );

## 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  $\lambda$ );
- Исследованы свойства иона молекулярного водорода над поверхностью;

## 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  $\lambda$ );
- Исследованы свойства иона молекулярного водорода над поверхностью;
- Построены профили эффективных потенциалов и исследовали поведения волновой функции электрона для различных значений параметров.

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

А в задаче с двумя ядрами при уменьшении значения коэффициента  $\lambda$ , уменьшается и равновесное расстояние между ядрами, что гипотетически может быть использовано для создания холодного термояда.



Спасибо за внимание!