

# Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

Alina Mreńca-Kolasińska

23 listopada 2021, ostatnia aktualizacja 6 kwietnia 2024

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Kropka kwantowa - układy dwustanowe

Qubit – jednostka informacji kwantowej. Kwantowomechanicznym układ w dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta. Różni się od klasycznego bitu tym, że może znajdować się w dowolnej superpozycji dwóch stanów kwantowych.

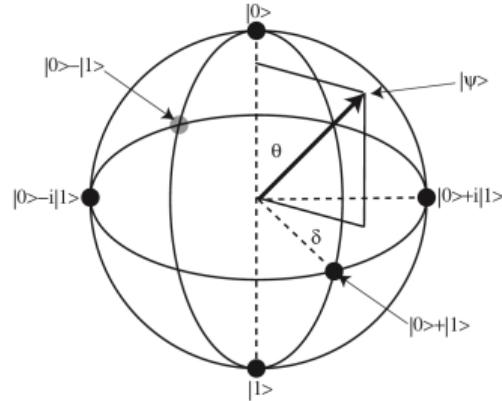
Przykłady 2-stanowych układów w kropkach kwantowych

- |  |                      |                      |
|--|----------------------|----------------------|
| • Stany                                | • $ 0\rangle$        | $ 1\rangle$          |
| • Spin w kropce kwantowej              | • $ \uparrow\rangle$ | $ \downarrow\rangle$ |
| • Ładunek w podwójnej kropce kwantowej | • $ L\rangle$        | $ R\rangle$          |
| • Para elektron-dziura w kropce        | • $ 0\rangle$        | $ X\rangle$          |

Stan qubitu (notacja Diraca):  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

# Reprezentacja na sferze Blocha

- Stan qubitu:  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$
- Możliwa parametryzacja przez  $\theta, \delta$ :  $\alpha = \cos(\theta/2)$ ,  $\beta = e^{i\delta} \sin(\theta/2)$   $|\psi\rangle = (\cos(\theta/2), e^{i\delta} \sin(\theta/2))^T$
- Kolejny sposób zapisu: wektor polaryzacji  
 $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ 
  - $P_i = \langle \sigma_i \rangle$
  - $\sigma_i$  – macierze Pauliego
$$P_x = \sin(\theta) \cos(\delta)$$
$$P_y = \sin(\theta) \sin(\delta)$$
$$P_z = \cos(\theta)$$
- $|\mathbf{P}| = 1$ , można przedstawić w 3D
- Początek wektora w środku układu współrzędnych, koniec na sferze (tzw. sferze Blocha)
- macierz gęstości



Sfera Blocha

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

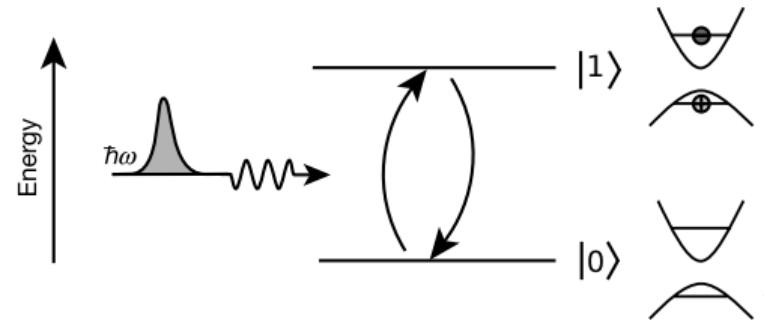
2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Oscylacje Rabiego

- Stan qubitu można „obracić” poprzez sprzężenie qubitu z polem np. elektrycznym
- Załóżmy, że układ dwustanowy  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  wzbudzamy przez zewnętrzne oscylujące pole
- Na przykład: laser wzbudzający parę elektron-dziura (ekscyton) w kropce kwantowej
- $|0\rangle$  – brak ekscytonu,  $|1\rangle$  – jeden ekscyton w kropce
- Mögliwe są stany wzbudzone ekscytonu, ale jeśli ich energie są znacznie wyższe, pomijamy je.



<sup>1</sup>A. Zrenner et al, Nature 418, 612 (2002)

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Ewolucja w czasie opisana jest przez hamiltonian

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + V(t), \quad V(t) = -eEx \sin(\omega t) = -eEx \frac{1}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Tu  $V(t)$  opisuje oscylujące pole elektryczne w kierunku  $x$ .
- Część niezaburzona równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle \tag{1}$$

- Ma rozwiązania

$$|\psi_n(t)\rangle = |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

$|n\rangle$  mogą być  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  lub wyższym stanem wzbudzonym.  $\omega_n = E_n/\hbar$

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Do równania opisującego układ ze wzbudzeniem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

wstawiamy rozwiązanie będące kombinacją stanów niezaburzonego układu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

- Po wstawieniu do (2)

$$i\hbar \sum_n \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \right) |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle \right] = \sum_n \left[ a_n(t) \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) V(t) |\psi_n(t)\rangle \right]$$

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Do równania opisującego układ ze wzbudzeniem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

wstawiamy rozwiązanie będące kombinacją stanów niezaburzonego układu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

- Po wstawieniu do (2)

$$i\hbar \sum_n \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \right) |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) \cancel{\frac{\partial}{\partial t}} |\psi_n(t)\rangle \right] = \sum_n \left[ a_n(t) \cancel{\hat{H}_0} |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) V(t) |\psi_n(t)\rangle \right]$$

$\psi_n(t)$  spełnia niezaburzone równanie Schrödingera (1)

- Przemnażamy przez  $\langle m | e^{i\omega_m t}$  i całkujemy

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez  $\langle m | e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \langle m | n \rangle = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \langle m | x | n \rangle e^{i(\omega_m - \omega_n)t} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez  $\langle m | e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m | x | n \rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_{mn}t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez  $\langle m | e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m | x | n \rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_{mn}t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Po przekształceniach

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m(t) = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) x_{mn} (e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - e^{i(\omega_{mn} - \omega)t})$$

# Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez  $\langle m | e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m | x | n \rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_m n t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Po przekształceniach

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m(t) = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) x_{mn} (e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - e^{i(\omega_{mn} - \omega)t})$$

- Do tej pory nie zrobiliśmy żadnych przybliżeń. Wprowadzamy przybliżenia:

- Uwzględniamy tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$
- Pominiemy człony z wysoką częstotliwością oscylacji – szybkozmienne człony ulegają uśrednieniu dla skali czasowej pomiaru oscylacji Rabiego.
- Jest to tzw. rotating wave approximation, RWA

# Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstotliwość wzbudzenia jest bliska rezonansowej  $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

# Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ  $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstotliwość wzbudzenia jest bliska rezonansowej  $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

# Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ  $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstotliwość wzbudzenia jest bliska rezonansowej  $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} - e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

# Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ  $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstotliwość wzbudzenia jest bliska rezonansowej  $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} + e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} + e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Ponieważ pomijamy cząłony inne niż  $\omega_{10} - \omega = \epsilon$  (RWA).

# Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ  $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstotliwość wzbudzenia jest bliska rezonansowej  $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} + e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} + e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Ponieważ pomijamy członki inne niż  $\omega_{10} - \omega = \epsilon$  (RWA).

- Analogicznie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(2\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i\epsilon t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

# Oscylacje Rabiego – układ równań

- Rozwiążemy układ równań:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) &= -\frac{eE}{2i} x_{01} a_1(t) e^{i\epsilon t} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) &= \frac{eE}{2i} x_{01}^* a_0(t) e^{-i\epsilon t} \end{aligned} \tag{5}$$

- Definiujemy

$$a_0(t) = e^{i\epsilon t/2} b_0(t), \quad a_1(t) = e^{-i\epsilon t/2} b_1(t)$$

- Po wstawieniu do (5) otrzymujemy

$$\begin{aligned} i\hbar \left( \frac{i\epsilon}{2} b_0(t) + \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) \right) e^{i\epsilon t/2} &= -\frac{eE}{2i} x_{01} b_1(t) e^{i\epsilon t/2} \\ i\hbar \left( -\frac{i\epsilon}{2} b_1(t) + \frac{\partial}{\partial t} b_1(t) \right) e^{-i\epsilon t/2} &= \frac{eE}{2i} x_{01}^* b_0(t) e^{-i\epsilon t/2} \end{aligned}$$

# Oscylacje Rabiego – układ równań

$$\frac{\partial}{\partial t} b_0(t) = \frac{\epsilon}{2i} b_0(t) + \frac{eE}{2\hbar} x_{01} b_1(t) \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b_1(t) = -\frac{\epsilon}{2i} b_1(t) - \frac{eE}{2\hbar} x_{01}^* b_0(t) \quad (7)$$

- Różniczkujemy (6)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) = \frac{\epsilon}{2i} \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) + \frac{eE}{2\hbar} x_{01} \frac{\partial}{\partial t} b_1(t) \quad (8)$$

- Wstawiamy (7) do (8)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) &= \underbrace{\frac{\epsilon}{2i} \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) - \frac{eE}{2\hbar} x_{01} \frac{\epsilon}{2i} b_1(t)}_{=(\epsilon/2i)^2 b_0} - \left( \frac{eE}{2\hbar} \right)^2 |x_{01}|^2 b_0(t) \\ &= (\epsilon/2i)^2 b_0 \text{ z rów. (6)} \end{aligned}$$

- Otrzymujemy równanie oscylatora harmonicznego

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) + \left( \left( \frac{\epsilon}{2} \right)^2 + \left( \frac{eE}{2\hbar} \right)^2 |x_{01}|^2 \right) b_0(t) = 0$$

# Oscylacje Rabiego – rozwiązanie

- Otrzymujemy równanie oscylatora harmonicznego

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) + \Omega^2 b_0(t) = 0, \quad \Omega = \sqrt{\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2 + \left(\frac{eE}{2\hbar}\right)^2 |x_{01}|^2}$$

- Rozwiązanie dla warunków początkowych  $b_0 = 1, b_1 = 0$  (stąd  $\partial b_0 / \partial t = \epsilon/2i, \partial b_1 / \partial t = -eEx_{01}^*/2\hbar$ )

$$b_0(t) = \cos(\Omega t) - \frac{i\epsilon}{2\Omega} \sin(\Omega t),$$
$$b_1(t) = -\frac{eEx_{01}^*}{2\hbar\Omega} \sin(\Omega t).$$

- Funkcja falowa

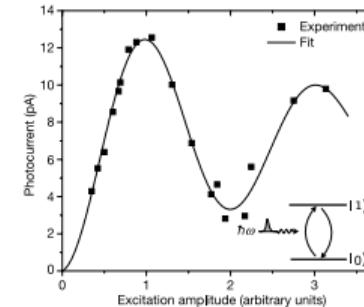
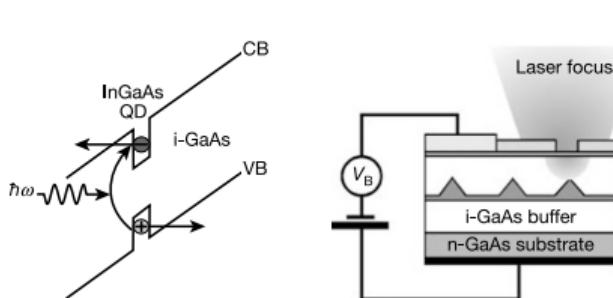
$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= a_0(t)|0\rangle e^{-i\omega_0 t} + a_1(t)|1\rangle e^{-i\omega_1 t} \\ &= b_0(t)e^{i\epsilon t/2}|0\rangle e^{-i\omega_0 t} + b_1(t)e^{-i\epsilon t/2}|1\rangle e^{-i\omega_1 t} \\ &= e^{i\epsilon t/2} \left[ \cos(\Omega t) - \frac{i\epsilon}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right] |0\rangle e^{-i\omega_0 t} \\ &\quad - e^{-i\epsilon t/2} \left[ \frac{eEx_{01}^*}{2\hbar\Omega} \sin(\Omega t) \right] |1\rangle e^{-i\omega_1 t}. \end{aligned}$$

# Oscylacje Rabiego – prawdopodobieństwa

- Prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie wzbudzonym

$$P_1(t) = |a_1(t)|^2 = \frac{(eE/2\hbar)^2 |x_{01}|^2}{(\epsilon/2)^2 + (eE/2\hbar)^2 |x_{01}|^2} \sin^2(\Omega t).$$

- W naszym przykładzie ze stanem  $|1\rangle$  opisującym eksciton w kropce kwantowej, impuls lasera trwający  $t_p$  jest powtarzany z częstotliwością  $1/t_r$ .
- Po każdym impulsie układ jest w stanie  $|\psi(t_p)\rangle$  – z prawdopodobieństwem  $P_1$  jest to eksciton.
- W polu elektrycznym eksciton rozпадa się na elektron i dziurę, wywołując prąd.
- Prąd od pojedynczego ekscytu jest niemierzalny. Prąd jest uśredniany po wielu impulsach.
- Uśredniony prąd jest proporcjonalny do  $P_1(t_p)$ .



# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

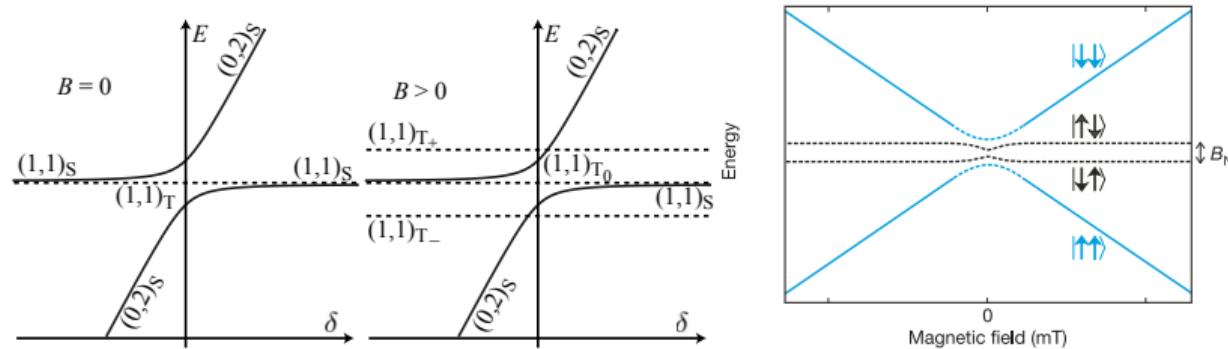
- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

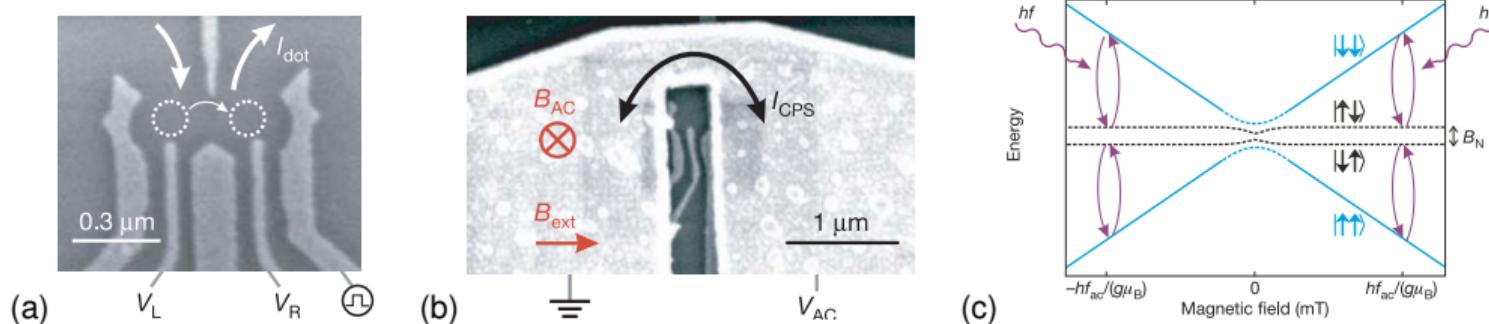
- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Pole nadsubtelne



- Spiny jądrowe półprzewodnika wytwarzają efektywne pole magnetyczne (tzw. pole Overhausera)
- Stany trypletowe mieszą się z singletowym ► dlaczego?
- W niezerowym polu magnetycznym stany  $T_+$  ( $| \uparrow\uparrow \rangle$ ) i  $T_-$  ( $| \downarrow\downarrow \rangle$ ) różnią się energią od  $T_0$  i  $S$ , (odpowiednio  $(| \uparrow\downarrow \rangle \pm | \downarrow\uparrow \rangle)/\sqrt{2}$ )
- $T_0$  i  $S$  mieszą się tworząc  $| \uparrow\downarrow \rangle$  i  $| \downarrow\uparrow \rangle$

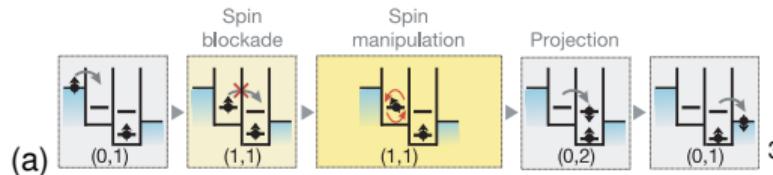
# Elektronowy rezonans spinowy w podwójnej kropce kwantowej



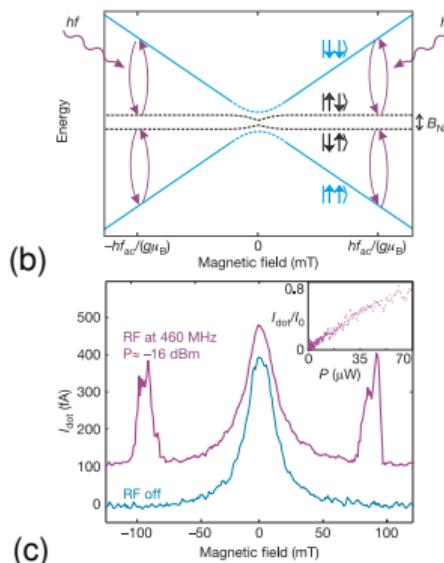
- Rozszczepienie Zeemana poziomów energetycznych elektronów przez pole magnetyczne  $B_{ext}$  w kierunku  $\hat{z}$ .
- Zmienne pole magnetyczne  $\mathbf{B}_{AC} = B_{AC}(\cos(2\pi f_{AC}t), \sin(2\pi f_{AC}t), 0)$  prostopadłe do  $B_{ext}$  wywołuje przejścia między tymi poziomami (gdy oscylacje w rezonansie z energią przejścia  $hf_{AC} = g\mu B_{ext}$ ) – Fig. (b, c).<sup>2</sup>
- Obserwacja oscylacji Rabiego.
- Niestety w pojedynczych kropkach kwantowych nie udało się dotąd tego zrealizować
  - Wymagane częstotliwości radiowe – wyindukowane pole elektryczne wypycha elektron z kropki
  - Zamiast tego zastosowane podwójne kropki kwantowe – Fig. (a).

<sup>2</sup>F. Koppens et al., Nature 442, 766 (2006).

# Elektronowy rezonans spinowy w podwójnej kropce kwantowej

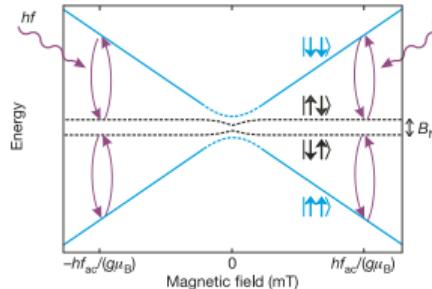
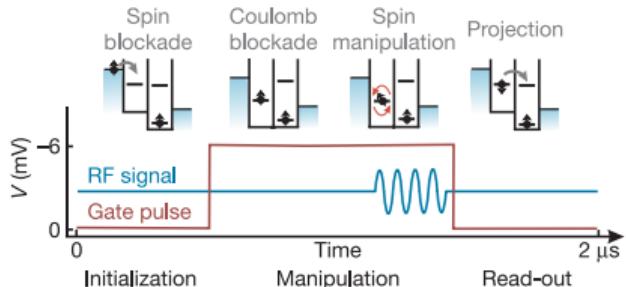


- Pole  $B_{ext}$  rozszczepia stany trypletowe. Stan podstawowy ma niezerowy spin  $\Rightarrow$  2 elektrony w stanie  $| \uparrow\uparrow \rangle \Rightarrow$  **spin blockade**
- Spin manipulation:** pole  $B_{AC}$  oscylujące z częstotliwością rezonansową może wywołać przejście  $| \uparrow\uparrow \rangle \rightarrow (| \downarrow\uparrow \rangle \pm | \uparrow\downarrow \rangle)/\sqrt{2}$
- Obrót spinu elektronu znosi blokadę spinową
- Projection:** przejście do stanu (0,2) i tunelowanie elektronu do elektrody  $\Rightarrow$  przepływ prądu i widoczne piki  $I_{dot}$  (gdy  $B_{ext} = \pm hf_{AC}/g\mu_B$ )

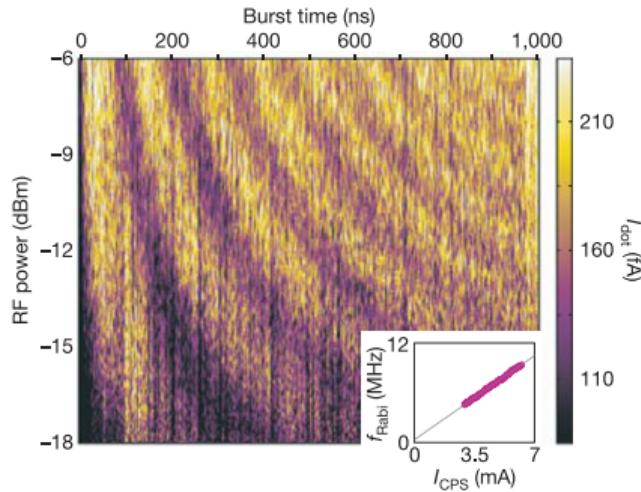


<sup>3</sup>Liczba elektronów w kropkach: ( $L, R$ ), np. (0, 1) – tylko 1 elektron w prawej kropce.

# Oscylacje Rabiego w podwójnej kropce kwantowej



- Częstotliwość  $f_{AC}$  obrotu  $B_{AC}$  ustalona w rezonansie z energią przejścia.
- Impuls pola  $B_{AC}$  trwający  $t_p$  prowadzi do obrotu spinu.
- Po czasie  $t_p$  mierzony jest prąd  $I_{dot}$ .
- Obrót jednego ze spinów o  $(2n + 1)\pi$   $\Rightarrow$  spiny w kropkach przeciwe  $|\uparrow\downarrow\rangle$  – maksimum prądu



# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Hamiltonian

- Równanie Schrödingera zależne od czasu

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

- Hamiltonian

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_t(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

- $V(\mathbf{r})$  – potencjał uwięzienia w QD
- $V_t(\mathbf{r}, t)$  – potencjał zależny od czasu

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Schemat Eulera

- Pochodna w czasie zapisana sposobem dyskretnym

- oznaczamy:  $t_m = m \cdot \Delta t$ .

- Iloraz różnicowy w przód

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (10)$$

- Iloraz różnicowy wstecz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_m) - \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1})}{\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 1, 2, \dots,$$

- zmiana indeksu  $m \rightarrow m + 1$ :

$$i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

(schemat niejawnny, tzn. wartość  $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$  w chwili  $t_{m+1}$  pojawia się po obu stronach równania)

# Schemat Cranka-Nicolson

- Ze wzorów (10) i (11) wyliczamy  $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$

$$(10) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m),$$

$$(11) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}),$$

- Schemat Cranka-Nicolson (C-N) to ich średnia arytmetyczna

$$\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[ \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) \right], \quad (12)$$

- Schemat jest niejawnym:  $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$  w chwili  $t_{m+1}$  pojawia się po obu stronach równania

- Za chwilę poznamy sposoby rozwiązywania go

# Schemat Cranka-Nicolson. 1D

- Hamiltonian

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) = -\frac{\hbar}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + V_t(x, t_m) \right) \Psi(x, t)$$

- Postać dyskretną  $\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m)$  znamy

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) \approx -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) \quad (13)$$

- Z rów. (12) dla 1D

$$\begin{aligned} \Psi(x_i, t_{m+1}) &= \Psi(x_i, t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[ -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_{m+1}) + \Psi(x_{i-1}, t_{m+1}) - 2\Psi(x_i, t_{m+1})}{\Delta x^2} \right. \\ &\quad \left. + V(x_i)(\Psi(x_i, t_m) + \Psi(x_i, t_{m+1})) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_{m+1})\Psi(x_i, t_{m+1}) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

## Schemat Cranka-Nicolson. 1D

- Oznaczmy  $\alpha \equiv -\frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2}$
- Rów. (13) możemy zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) = \begin{pmatrix} -2\alpha + V_0 & \alpha & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha & -2\alpha + V_1 & \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & -2\alpha + V_2 & \alpha & \cdots & 0 \\ & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha & -2\alpha + V_{n-1} & \alpha \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \alpha & -2\alpha + V_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi(x_0, t_m) \\ \Psi(x_1, t_m) \\ \Psi(x_2, t_m) \\ \vdots \\ \Psi(x_{n-1}, t_m) \\ \Psi(x_n, t_m) \end{pmatrix}$$

- $\Psi(x_i, t_m)$  jest elementem wektora  $\Psi(t_m)$

# Schemat Cranka-Nicolson. 1D

- Zapiszmy schemat C-N w postaci macierzowej

$$\Psi(t_{m+1}) = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} [\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})].$$

- Sposoby rozwiązania:

- ① Poprzez sprowadzenie do układu równań
- ② Rozwiązanie iteracyjne

# Sposób 1

- Przenosimy wyrazy z  $t_{m+1}$  na lewą stronę

$$\left[ \mathbf{1} - \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_{m+1}) \right] \Psi(t_{m+1}) = \left[ \mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_m) \right] \Psi(t_m),$$

- Oznaczając

$$\mathbf{y} \equiv \left[ \mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_m) \right] \Psi(t_m),$$

$$\mathbf{A} \equiv \left[ \mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_{m+1}) \right],$$

$$\mathbf{x} \equiv \Psi(t_{m+1}),$$

- Rozwiązywanie układu równań  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  (np. biblioteki numeryczne)

## Sposób 2

- Początkowo przyjmujemy  $\Psi(t_{m+1})^{(0)} = \Psi(t_m)$ 
  - Jest to pierwsze przybliżenie  $\Psi(t_{m+1})$

- Następne, lepsze przybliżenie

$$\Psi(t_{m+1})^{(1)} = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} [\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})^{(0)}],$$

- Dokonujemy kolejnych iteracji

$$\Psi(t_{m+1})^{(k+1)} = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} [\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})^{(k)}],$$

- Przy odpowiednio dużej liczbie  $k$  iteracji  $\Psi(t_{m+1})^{(k+1)} \approx \Psi(t_{m+1})^{(k)} \approx \Psi(t_{m+1})$

- Tzn.  $\Psi(t_{m+1})^{(k)}$  przestaje się znacząco zmieniać.
- Możemy sprawdzić, czy np.  $|\sum_i \Psi(x_i, t_{m+1})^{(k+1)}| - |\sum_i \Psi(x_i, t_{m+1})^{(k)}| < \delta$ , gdzie  $\delta$  jest małą liczbą.

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- **Schemat Askara-Cakmaka**
- Laboratorium

# Schemat Askara-Cakmaka

- Pochodna w czasie – centralny iloraz różnicowy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1})}{2\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (15)$$

- Schemat jest jawny:

$$\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1}) + \frac{2\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad (16)$$

Jednak musimy znać funkcję falową w  $t = t_0$  i  $t = t_1$ , zwykle znamy tylko  $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ .

- $\Psi(\mathbf{r}, t_1)$  można obliczyć przy pomocy innych metod, np. schematu C-N.

# Schemat Askara-Cakmaka. 1D

- Przypomnienie: Hamiltonian w postaci dyskretnej

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) \approx -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m)$$

- Schemat A-C w 1D:

$$\begin{aligned}\Psi(x_i, t_{m+1}) = \Psi(x_i, t_{m-1}) + \frac{2\Delta t}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} \right. \\ \left. + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) \right]\end{aligned}\quad (17)$$

# Stabilność

▶ Analiza von Neumanna

- Schemat C-N jest stabilny dla każdego  $\Delta t$ .

- Schemat A-C: warunek stabilności w 1D

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Schemat A-C: warunek stabilności w 3D

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

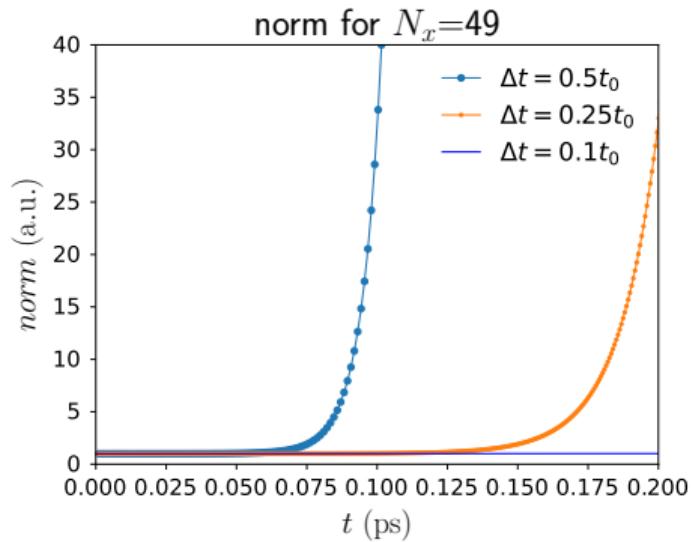
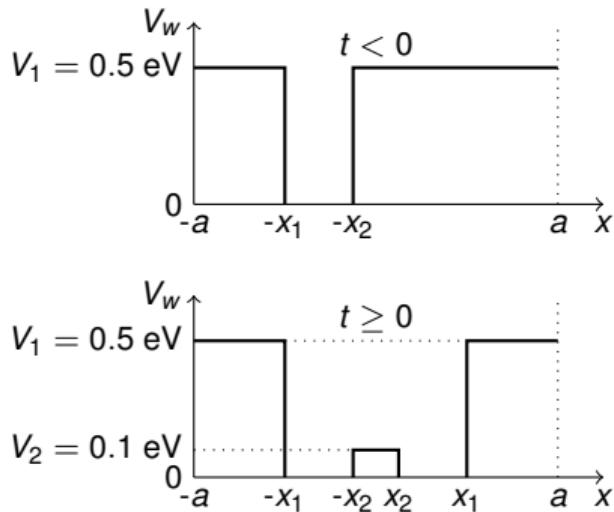
- Dla  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$  otrzymujemy

$$\frac{\Delta x^2}{3\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

## Metody: C-N oraz A-C – przykłady

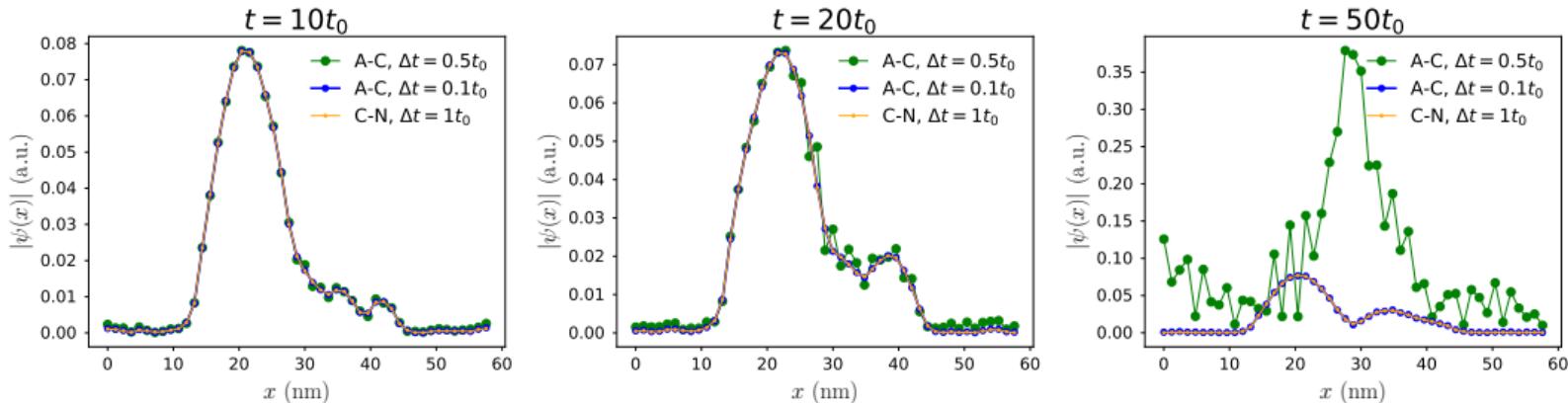
Kropka w 1D o potencjale zmiennym w chwili  $t = 0$  jak poniżej.

Zależność normy funkcji falowej od czasu dla różnych  $\Delta t$  ( $t_0 = 2.4189 \times 10^{-5}$  ps):



- Schemat A-C stabilny dla małych  $\Delta t$

## Metody: C-N oraz A-C – moduł funkcji falowej



- Schemat A-C stabilny tylko dla odpowiednio małych  $\Delta t$ .
- Schemat C-N stabilny dla większych  $\Delta t$ .
- Jednak dokładność wyniku zależy od  $\Delta t$ , duże nie zawsze lepsze.
- w C-N często obliczenia bardziej czasochłonne niż A-C. (C-N: schemat niejawny)

## Inne metody dla problemów zależnych od czasu<sup>4</sup>

- Metoda Floqueta – dla Hamiltonianu periodycznego w czasie
- Metoda wariacyjna zależna od czasu
- Wykorzystanie operatora ewolucji w czasie
- Metoda operatora podzielonego (ang. split operator method)

---

<sup>4</sup>Szczegóły np. K. Varga, J. A Driscoll, Computational nanoscience: Applications for molecules, nanoclusters and solids. Cambridge University Press, 2011.

# Plan

1

## Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

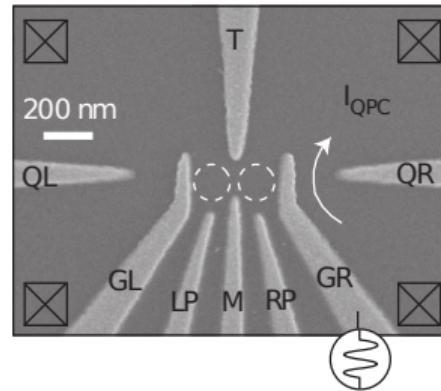
2

## Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

# Laboratorium: Symulacja eksperymentu

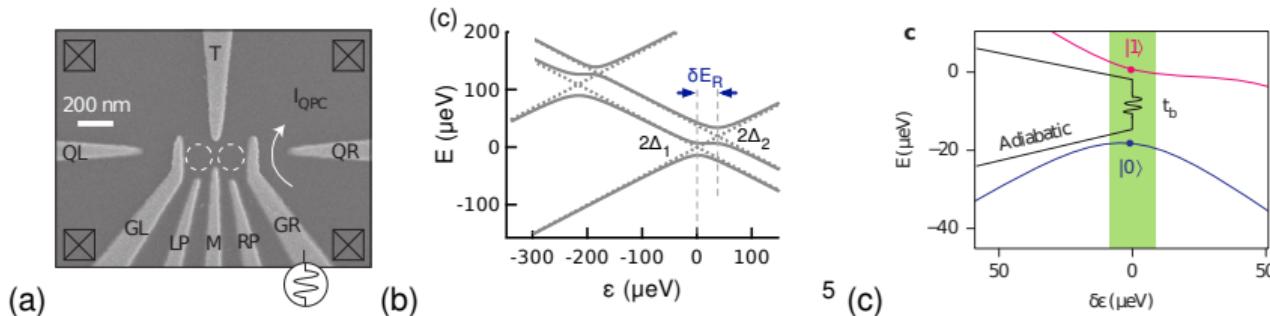
Nat. Nano 10, 243 (2015)



- Operacje na qubitach w podwójnych QD Si/SiGe
- Tu: 3 elektryny, tworzące konfiguracje ładunkowe (2, 1), (1, 2).
- Oznaczenie:  $(n_L, n_R)$ , gdzie  $n_L(n_R)$  - liczba elektronów w kropce lewej (prawej)

# Laboratorium: Symulacja eksperymentu

Nat. Nano 10, 243 (2015)

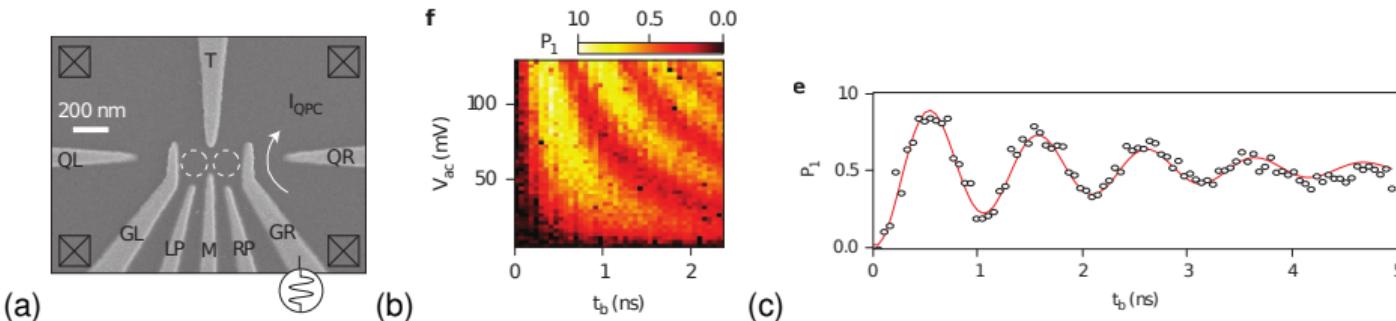


- Detuning  $\delta\epsilon$  regulowane przez napięcie  $V_{GL}$
- 2 stany podstawowe tych konfiguracji:  $\delta\epsilon < 0 \Rightarrow |L\rangle = |2, 1\rangle$ ,  $\delta\epsilon > 0 \Rightarrow |R\rangle = |1, 2\rangle$ 
  - W tej konfiguracji kropki posiadają więcej stanów [Rys. (b)], skupiamy się na 2 najniższych
- Anticrossing przy  $\delta\epsilon = 0$  ze względu na mieszanie  $|L\rangle$  i  $|R\rangle$  [Rys. (c)]
- Logiczne qubity ( $\delta\epsilon=0$ )  $|0\rangle = (|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$ ,  $|1\rangle = (|L\rangle - |R\rangle)/\sqrt{2}$

<sup>5</sup>Nat Commun 5, 3020 (2014). <https://doi.org/10.1038/ncomms4020>

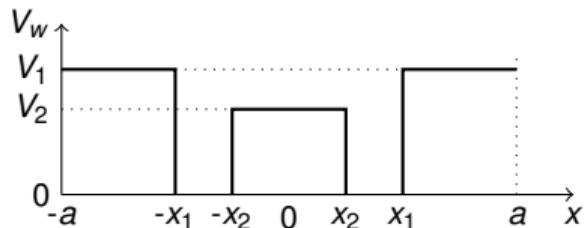
# Laboratorium: Symulacja eksperymentu

Nat. Nano 10, 243 (2015)



- Wzbudzenie: impuls oscylującego napięcia na GR [Rys. (a)]
  - Gdy częstotliwość  $f_{ex}$  jest w rezonansie z różnicą energii stanów  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ , wzbudzenie  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$
- Pomiar oscylacji Rabiego (2 stany:  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ )
- Częstotliwość rezonansowa  $f_{ex} = 4.54$  GHz:
  - [Rys. (b)] - zależność  $P_1$  od czasu  $t_b$  i amplitudy wzbudzenia  $V_{ac}$
  - [Rys. (c)] - zależność  $P_1$  od czasu  $t_b$  przy  $V_{ac} = 70$  mV

# Laboratorium: uproszczenia



- Rozważamy kropki jednowymiarowe

- Hamiltonian:

$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_w(x) + V_t(x, t),$$

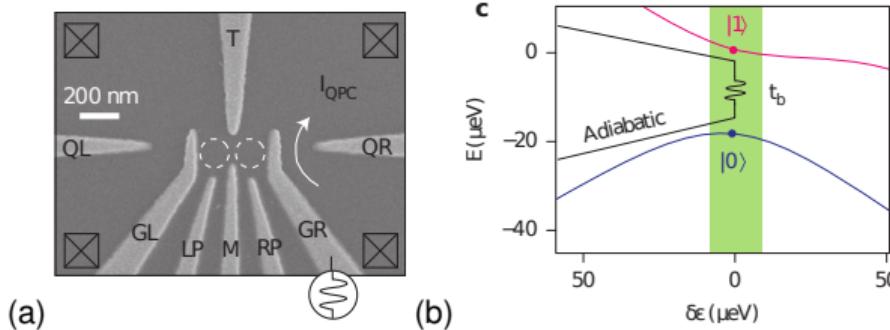
- Dokładna symulacja profilu potencjału byłaby wymagająca. Zamiast tego zakładamy:

- Potencjał uwięzienia w kropkach:  $V_w(x)$  [Rys. (a)]
- Symulujemy oscylujący potencjał liniowy

$$V_t(x, t) = Fx \sin(\omega t),$$

- Eksperyment: stany 3-elektronowe – dla przyspieszenia symulujemy qubit dla stanu z 1 elektronem

# Szczegóły pomiaru (nie uwzględniane w symulacji)



## • Inicjalizacja

- Stan  $|L\rangle$  przygotowany dla  $\delta\epsilon_r = -160 \mu\text{eV}$
- [Rys. (b)] przy zmianie (liniowo) do  $\delta\epsilon = 0$  (przez 4 ns), stan  $|L\rangle$  adiabatycznie<sup>6</sup> przechodzi w  $|0\rangle$

## • Wzbudzenie: oscylujące napięcie przyłożone do GR [Rys. (a)]

- Impuls o czasie  $t_b$
- Gdy częstotliwość jest w rezonansie z różnicą energii stanów  $|0\rangle$  i  $|1\rangle$ , wzbudzenie  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$
- Po czasie  $t_b$ , ponownie  $\delta\epsilon$  liniowo zwiększone do  $\delta\epsilon = \delta\epsilon_r$
- Przy zmianie do  $\delta\epsilon = \delta\epsilon_r$ , zachodzi przejście adiabatyczne  $|0\rangle \rightarrow |L\rangle, |1\rangle \rightarrow |R\rangle$

## • $P_1$ , prawdopodobieństwo elektronu w stanie $|1\rangle$ zmierzone przez pomiar zmian $I_{QPC}$

- Poprzez charge sensing: [szczegóły](#) oraz [wersja arxiv](#)

<sup>6</sup>Przy stopniowej zmianie parametrów układ dostosowuje się do konfiguracji. Będąc początkowo w stanie własnym hamiltonianu, po zmianie przechodzi w odpowiedni stan własny końcowego hamiltonianu.

3

- Oddziaływanie nadsubtelne – pole Overhausera
- Niedawne przykłady kropek kwantowych

# Oddziaływanie nadsubtelne

▶ Powrót

- Elektron w kropce oddziałuje z wieloma spinami jądrowymi atomów np. Ga i As (spin jądrowy 3/2)
- Hamiltonian opisujący oddziaływanie nadsubtelne (ang. *hyperfine*):

$$\hat{H}_{HF} = \sum_i A_i \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{S}$$

- $\mathbf{I}_i$  – operator spinu jądrowego dla atomu  $i$
- $\mathbf{S}$  – operator spinu elektronu
- Wytwarza to efektywne pole magnetyczne, które można przybliżyć przez klasyczne tzw. pole Overhausera, odczuwane efektywnie przez elektrony w kropce

$$\mathbf{B}_N = \frac{1}{g^* \mu_B} \left\langle \sum_i A_i \mathbf{I}_i \right\rangle$$

- $g^*$  jest efektywną stałą Landégo
- $A_i$  – stała sprzężenia
- Pole jest zależne od położenia i nieregularne

# Oddziaływanie nadsubtelne

Powrót

- Efektywny hamiltonian z polem Overhausera dla dwóch elektronów

$$\hat{H} = \frac{1}{2} g^* \mu_B (\mathbf{B}_{N1} \boldsymbol{\sigma}_1 + \mathbf{B}_{N2} \boldsymbol{\sigma}_2)$$

- Np. w bazie funkcji podwójnej kropki  $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$  ( $(1,1)_S$ ),  $|\uparrow\uparrow\rangle$  ( $(1,1)_{T_+}$ ),  $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$  ( $(1,1)_{T_0}$ ),  $|\downarrow\downarrow\rangle$  ( $(1,1)_{T_-}$ ),

$$\begin{pmatrix} 0 & \Delta_x - i\Delta_y & \Delta_z & -\Delta_x - i\Delta_y \\ \Delta_x + i\Delta_y & -\Sigma_z & \Sigma_x + i\Sigma_y & 0 \\ \Delta_z & \Sigma_x - i\Sigma_y & 0 & \Sigma_x + i\Sigma_y \\ -\Delta_x + i\Delta_y & 0 & \Sigma_x - i\Sigma_y & \Sigma_z \end{pmatrix}$$

- $\Delta_i = B_{i1} - B_{i2}$ ,  $\Sigma_i = (B_{i1} - B_{i2})/\sqrt{2}$ ,  $i = x, y, z$
- Pojawia się sprzężenie między singletem a trypletem (prowadzi do anticrossingu)
- W wysokim polu magnetycznym energia  $T_{\pm}$  jest daleka od energii singletu, ale  $T_0$  miesza się z  $S$  prowadząc do rozszczepienia i powstania nowych stanów  $|\uparrow\downarrow\rangle$  i  $|\downarrow\uparrow\rangle$

## Inne schematy

- Dlaczego nie wykorzystać prostszego schematu, np. Eulera? Wzór (10):

$$i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_m)\Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (18)$$

- Schemat jest jawnym. Przykład w 1D:

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} + i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} \quad (19)$$

- Analiza von Neumanna schematu Eulera,  $\gamma = \frac{\Delta t \hbar}{2m^* \Delta x^2}$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ w_j^k + i\gamma \left( w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

# Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left( e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k/J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmacniania większy od 1 dla każdego  $k \neq 0$ .

# Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left( e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k/J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmacniania większy od 1 dla każdego  $k \neq 0$ .
- Jednak po przejściu na czas urojony:

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} + \frac{\Delta\tau}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2}$$

# Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left( e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k/J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmacniania większy od 1 dla każdego  $k \neq 0$ .

- Jednak po przejściu na czas urojony:

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} + \frac{\Delta\tau}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2}$$

- Analiza von Neumanna ( $\gamma = \frac{\Delta\tau\hbar}{2m^*\Delta x^2}$ )

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ w_j^k + \gamma \left( w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

# Analiza z czasem urojonym

- Współczynnik wzmacniania

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + \gamma \left( e^{2\pi i k/J} + e^{-2\pi i k/J} - 2 \right)$$

- Moduł

$$\begin{aligned}|M^k| &= |1 + \gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 \leq 1 \\-1 &\leq 1 + \gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2] \leq 1 \\-2 &\leq 2\gamma \underbrace{[\cos(2\pi k/J) - 1]}_{-2 \leq \cos -1 \leq 0} \leq 0\end{aligned}$$

- $\gamma$  nie może być większa niż 1 ( $\gamma = \frac{\Delta\tau\hbar}{2m^*\Delta x^2}$ )

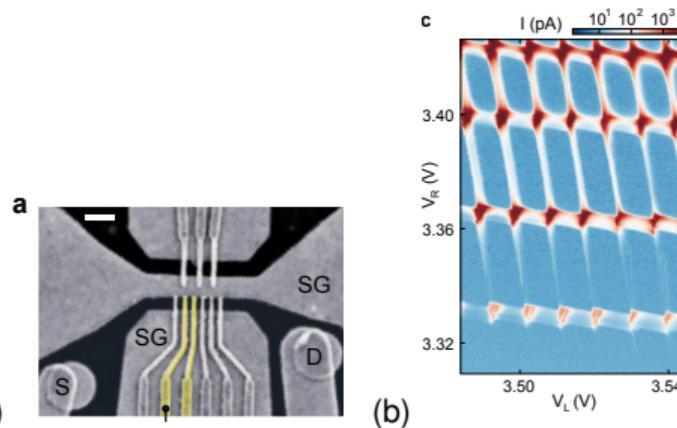
$$\gamma \leq 1 \Rightarrow \frac{\hbar\Delta\tau}{2m^*\Delta x^2}$$

- Metoda czasu urojnego stabilna gdy  $\Delta\tau \leq 2m\Delta x^2/\hbar$ .

3

- Oddziaływanie nadsubtelne – pole Overhausera
  - Niedawne przykłady kropek kwantowych

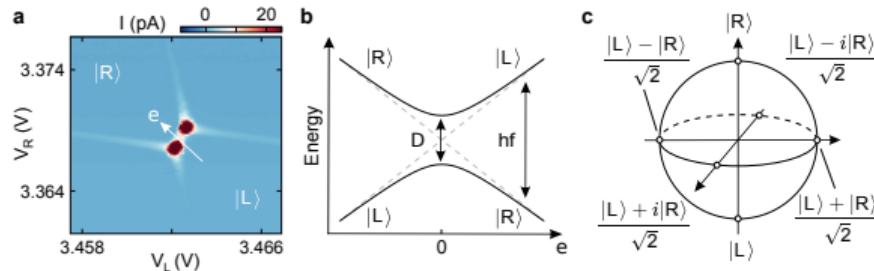
# Oscylacje ładunku w podwójnych kropkach kwantowych w dwuwarstwowym grafeniu<sup>7</sup>



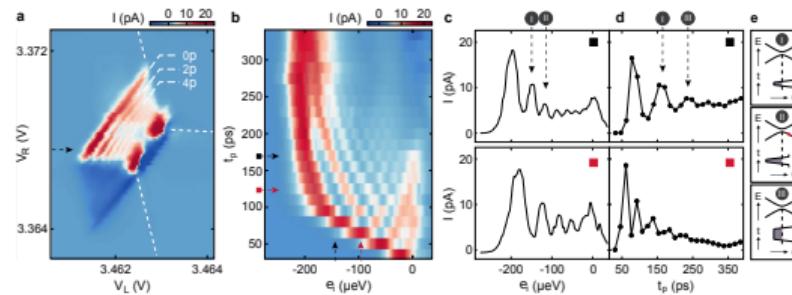
- Podwójna kropka wytworzona przez bramki
- Diagram stabilności

<sup>7</sup>Katrin Hecker, et al, arXiv:2303.10119, 17 Mar 2023

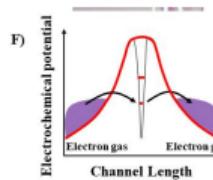
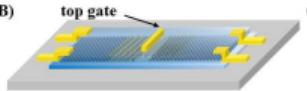
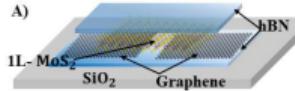
# Oscylacje ładunku w podwójnych kropkach kwantowych w dwuwarstwowym grafeniu



- Dwa stany – qubit



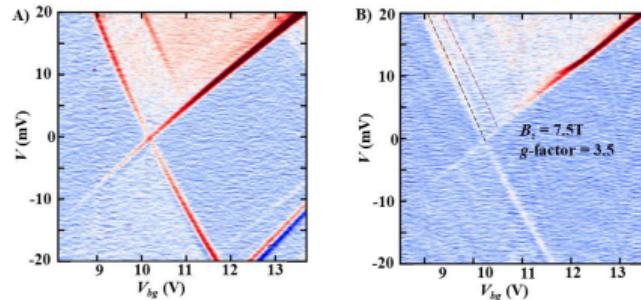
# Kropki kwantowe w dichalkogenkach metali przejściowych ( $\text{MoS}_2$ )<sup>8</sup>



- Wąska kropka
- Spektroskopia stanów wzbudzonych
- Rozszczepienie Zeemana
- Pomiar współczynnika Landego  $g$

<sup>8</sup>P. Kumar, et al, arXiv:2303.15425 , 27 Mar 2023

# Kropki kwantowe w dichalkogenkach metali przejściowych ( $\text{MoS}_2$ )



- Wąska kropka
- Spektroskopia stanów wzbudzonych
- Rozszczepienie Zeemana
- Pomiar współczynnika Landego  $g$

# Stabilność, spójność, zbieżność

Powrót

Powyższe schematy stanowią przybliżenie równania różniczkowego. Jakie wartości  $\Delta x$ ,  $\Delta t$ , mają sens?

Oznaczmy  $S_{\Delta t}$  jako pojedynczy krok czasowy dla schematu.

Podstawowe pojęcia dla problemów zależnych od czasu:

- Spójność – schemat w granicy zerowego kroku czasowego/przestrzennego dąży do równania różniczkowego
  - Rząd dokładności jest równy  $p$  gdy

$$\|\psi(t + \Delta t) - S_{\Delta t}\psi(t)\| = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1}) \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad \text{dla } t \in [0, T].$$

- Spójny, gdy  $p > 0$ .
- Zbieżność – rozwiązanie numeryczne w granicy zerowego kroku czasowego/przestrzennego dąży do rozwiązania dokładnego

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0, n\Delta t = t} \|S_{\Delta t}^n \psi(0) - \psi(t)\| = 0.$$

- Stabilność – norma rozwiązania pozostaje skończona

$$\|S_{\Delta t}^n\| \leq C \quad \text{dla danego } C, \quad 0 < n\Delta t < T.$$

- Bezwzględna stabilność: schemat stabilny dla każdego  $n$ .

## Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn.  $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla  $n \rightarrow \infty$ , to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni  $\mathbf{r}$  i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

## Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn.  $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla  $n \rightarrow \infty$ , to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni  $\mathbf{r}$  i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*}$$

# Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn.  $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla  $n \rightarrow \infty$ , to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni  $\mathbf{r}$  i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[ \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*}$$

# Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn.  $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla  $n \rightarrow \infty$ , to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni  $\mathbf{r}$  i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[ \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} \left[ \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right]$$

# Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn.  $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla  $n \rightarrow \infty$ , to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni  $\mathbf{r}$  i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[ \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} \underbrace{\left[ \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right]}_{\Psi_k^{(m)*}}$$

# Analiza von Neumanna schematu C-N w 1D

- Wyrażamy rozwiązanie w postaci TF

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k, \quad \Psi_j^{(m+1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k, \quad w_j^k = \exp\left(i \frac{2\pi j k}{J}\right)$$

- Do schematu, rów. (14); zakładamy  $V \equiv 0, V_t \equiv 0$

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} - \frac{\Delta t}{2i\hbar} \frac{\hbar}{2m^*} \left[ \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{j+1}^{(m+1)} + \Psi_{j-1}^{(m+1)} - 2\Psi_j^{(m+1)}}{\Delta x^2} \right]$$

- Wstawiamy TF, ozn.  $\frac{\Delta t}{2i\hbar} \frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2} = -i\alpha$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ w_j^k + i\alpha (w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k) \right] - \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} \left[ -i\alpha (w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k) \right]$$

# Analiza von Neumann schematu C-N w 1D

- Każdy wyraz sumy powinien być identyczny,  $k = 0, 1, \dots, J - 1$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} \left[ w_j^k - i\alpha (w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k) \right] = \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ w_j^k + i\alpha (w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k) \right]$$

- Zauważamy, że  $w_j^k = e^{i2\pi jk/J}$ , więc  $w_{j\pm 1}^k = w_j^k e^{\pm i2\pi k/J}$

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} e^{2\pi ijk/J} \left[ 1 - i\alpha (e^{2i\pi k/J} + e^{-2i\pi k/J} - 2) \right] &= \tilde{\Psi}_k^{(m)} e^{2\pi ijk/J} [1 + i\alpha (e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2)] \\ \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} [1 - i\alpha (2 \cos(2\pi k/J) - 2)] &= \tilde{\Psi}_k^{(m)} [1 + i\alpha (2 \cos(2\pi k/J) - 2)] \end{aligned}$$

- Współczynnik wzmacniania  $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$

# Analiza von Neumann schematu C-N w 1D

Powrót

- Współczynnik wzmacnienia  $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$  powinien spełniać  $|M^k| \leq 1$

$$M^k = \frac{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}$$

$$|M^k|^2 = \frac{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]} \frac{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]} = 1$$

$$|M^k| \leq 1$$

- Schemat C-N jest stabilny dla każdego  $\Delta t$ .**

# Analiza von Neumanna schematu A-C w 1D

- Przypomnienie: rozwiązywanie w postaci TF

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k, \quad \Psi_j^{(m+1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k, \quad \Psi_j^{(m-1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k, \quad w_j^k = \exp\left(i \frac{2\pi j k}{J}\right)$$

- Do schematu, rów. (17); zakładamy  $V \equiv 0, V_t \equiv 0$

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m-1)} - \frac{2\Delta t}{i\hbar} \frac{\hbar}{2m^*} \left[ \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} \right]$$

- Wstawiamy TF, ozn.  $\frac{2\Delta t}{i\hbar} \frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2} = -i\beta$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k + \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ i\beta \left( w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

# Analiza von Neumann schematu A-C w 1D

- Każdy wyraz sumy powinien być identyczny,  $k = 0, 1, \dots, J - 1$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k + \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[ i\beta \left( w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

- Przypomnienie,  $w_j^k = e^{2\pi i j k / J}$ , więc  $w_{j\pm 1}^k = w_j^k e^{\pm 2\pi i k / J}$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} e^{2\pi i j k / J} = \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} e^{2\pi i j k / J} + \tilde{\Psi}_k^{(m)} e^{2\pi i j k / J} [i\beta (e^{2\pi i k / J} + e^{-2\pi i k / J} - 2)]$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} = \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} + \tilde{\Psi}_k^{(m)} [2i\beta (\cos(2\pi k / J) - 1)]$$

- Współczynnik wzmacniania  $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$

# Analiza von Neumann schematu A-C w 1D

Powrót

- Współczynnik wzmacniania  $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = \tilde{\Psi}_k^{(m)} / \tilde{\Psi}_k^{(m-1)}$

$$(M^k)^2 - 2i\beta M^k [\cos(2\pi k/J) - 1] - 1 = 0$$

- Równanie kwadratowe. Rozwiązania:

$$(M^k)_{1,2} = i\beta[\cos(2\pi k/J) - 1] \pm \sqrt{1 - \beta^2 [\cos(2\pi k/J) - 1]^2}$$

- Kwadrat modułu:

$$(M^k)_{1,2}(M^k)_{1,2}^* = 1 \dots$$

- ALE:** wartość pod pierwiastkiem może być ujemna, gdy:  $\cos(2\pi k/J) \approx -1$  i  $\beta$  duże<sup>9</sup>.

- Graniczny przypadek  $(\cos(\pi) - 1)^2 = 4$

- Wymagamy

$$1 - 4\beta^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \beta \leq \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

<sup>9</sup> Robert J. Rubin, J. Chem. Phys. 70, 4811 (1979).

# Analiza von Neumann schematu A-C

Powrót

- W 1D Otrzymaliśmy

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Warunek stabilności w 3D

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Dla  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$  otrzymujemy

$$\frac{\Delta x^2}{\sqrt{3}\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Jest to oszacowanie przy  $V \equiv 0$ . W ogólnych przypadkach stabilność może mieć większe ograniczenia.