

УДК 519.673

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОХОЖДЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ В СИСТЕМЕ СВЯЗАННЫХ КВАНТОВЫХ ВОЛНОВОДОВ

М.И. Гаврилов, И.Ю. Попов

Построена математическая модель системы связанных волноводов. С ее помощью появилась возможность численно получать зависимость коэффициентов прохождения от геометрических и энергетических параметров системы.

Ключевые слова: квантовая механика, связанные волноводы, численное моделирование.

Введение

Принципиально новые возможности в построении вычислительных систем открывает перед нами квантовая механика, так как сложность квантовой системы возрастает экспоненциально относительно ее размера [1]. Проблема квантовых вычислений тесно связана со сложностью физической реализации. В настоящее время существует несколько возможных элементных баз для квантового компьютера: связанные ионы, ядерный магнитный резонанс в жидкости, квантовые точки и др. [2]. Каждая из них имеет свои преимущества, но и соответствующие недостатки. Идеальной для реализации базы пока не существует, поэтому актуальна проблема исследования и разработки наноустройств для квантовых вычислений.

Целью данной работы является исследование поведения плоских слабосвязанных наноструктур, как возможной основы для реализации квантовых элементов. В работе произведено построение математической модели системы связанных волноводов. С ее помощью появилась возможность численно получать зависимость коэффициентов прохождения от геометрических и энергетических параметров системы. Это позволяет подобрать необходимые характеристики для требуемого в конкретных задачах поведения системы. Кроме того, данную модель можно использовать для поиска стационарных состояний волновой функции для заданной системы.

Математическая модель

Для исследования возможности построения квантовых операций при «волноводной» [3, 4] интерпретации очень важно знание коэффициентов прохождения и отражения в системе при различных значениях ее параметров. Рассмотрим систему двух волноводов, связанных через отверстия, с условиями Дирихле на границе (рис. 1).

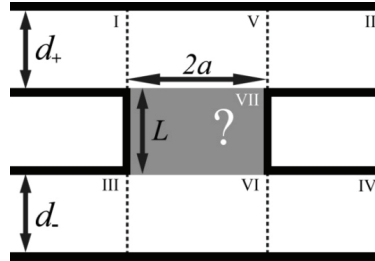


Рис. 1. Схема математической модели системы связанных волноводов

При этом допускается, что в области связи могут быть введены некоторые дополнительные условия, зависящие только от вертикальной координаты, например, потенциал, электрическое поле и др. Пусть ширины верхнего и нижнего волноводов равны d_+ и d_- соответственно, $b = 2a$ – ширина окна, L – высота области связи (если область связи отсутствует, то $L = 0$). Положим также полную энергию электрона равной k^2 .

В силу квантовых свойств системы поперечная составляющая волновой функции в волноводе ширины d может выступать только как суперпозиция квантованного набора состояний $\sin\left(\frac{n\pi}{d}y\right)$. Воспользовавшись этим свойством, зададим в первой граничной области волновую функцию в виде [5]:

$$\Psi_I = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{d_+}(y-L-d_-)\right) \left(a_n e^{ik_n^+ x} + b_n e^{-ik_n^+ x} \right),$$

где $k_n^+ = \sqrt{k^2 - (n\pi/d_+)^2}$. Соответствующие коэффициенты для волновых функций остальных трех граничных областей Ψ_{II} , Ψ_{III} и Ψ_{IV} положим равными c_n и d_n , g_n и h_n , p_n и q_n соответственно.

В области взаимодействия положим волновую функцию в виде:

$$\Psi_{VII} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \Phi(y, k'_n),$$

где $k'_n = \sqrt{k^2 - (n\pi/2a)^2}$. В областях, прилегающих к отверстию, представим ее в виде суммы продольной и поперечной составляющих

$$\Psi_V = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{d_+}(y-L-d_-)\right) \left(e_n e^{ik_n^+ x} + r_n e^{-ik_n^+ x} \right) + \sum_{i=1}^{\infty} t_n \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \Phi^+(y, k'_n).$$

Аналогично вводим коэффициенты v_n , u_n и w_n для волновой функции нижнего волновода в области VI. Совокупность функций $\Phi(y, k'_n)$ и $\Phi^\pm(y, k'_n)$ образуют базисный набор функций, по которым раскладывается y -составляющая в этих областях. Так, например, в отсутствии внешних полей они будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \Phi(y, k'_n) &= f_n e^{ik'_n y} + e_n e^{-ik'_n y}, \\ \Phi^+(y, k'_n) &= \sin(k'_n(y - d_+ - L - d_-)), \\ \Phi^-(y, k'_n) &= \sin(k'_n y). \end{aligned}$$

Будем также обозначать символами $\phi(y, k'_n)$ и $\phi^\pm(y, k'_n)$ производные по y соответствующих функций.

Проведем согласование разложения на границах областей по значениям и первым производным вдоль нормали:

$$\Psi_i = \Psi_j, \frac{\partial \Psi_i}{\partial n} = \frac{\partial \Psi_j}{\partial j}.$$

Уравнения, соответствующие «вертикальным» граничным условиям, умножаем на $\sin\left(\frac{\pi n}{d_{\pm}} y\right)$ и интегрируем по длине границы. В силу ортогональности базиса синусов имеем:

$$\int_0^{d_{\pm}} \sin\left(\frac{n\pi}{d_{\pm}}\right) \sin\left(\frac{m\pi}{d_{\pm}}\right) dy = \frac{\pi}{2} \delta_{mn}.$$

Введем так же обозначение A_{nm}^{\pm} :

$$A_{nm}^+ = \frac{m\pi}{bd_+k_n^+} \int_{L+d_-}^{L+d_-+d_+} \Phi^+(y, k_m) \sin\left(\frac{n\pi}{d_+}(y-L-d_-)\right) dy,$$

$$A_{nm}^- = \frac{m\pi}{bd_-k_n^-} \int_0^{d_-} \Phi^-(y, k_m) \sin\left(\frac{n\pi}{d_-} y\right) dy.$$

Таким образом, во введенной системе обозначений, получаем систему линейных уравнений. Решение дает значение выходных параметров b_m, c_m, h_m и p_m относительно входных a_m, d_m, g_m и q_m :

$$b_n = d_n + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^+ \left(1 - (-1)^m e^{ik_n^+ b}\right) t_n, \quad c_n = a_n + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^+ \left(1 - (-1)^m e^{-ik_n^+ b}\right) t_n,$$

$$h_n = q_n + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^- \left(1 - (-1)^m e^{ik_n^- b}\right) w_n, \quad p_n = g_n + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^- \left(1 - (-1)^m e^{-ik_n^- b}\right) w_n.$$

Сами значения t_n и w_n определяются из «горизонтальной» системы связи в районе окна:

$$\begin{cases} t_n \Phi^+(L+d_-, k'_n) = \Phi(L+d_-, k'_n), \\ w_n \Phi^-(d_-, k'_n) = \Phi(d_-, k'_n), \\ \varphi(L+d_-, k'_n) = i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^+ t_l + X_n + t_n \varphi^+(L+d_-, k'_n), \\ \varphi(d_-, k'_n) = i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^- w_l + Y_n + w_n \varphi^-(d_-, k'_n), \end{cases} \quad (1)$$

где

$$C_{nl}^{\pm} = 2(1+(-1)^{n+l}) \sum_{m=1}^{\infty} B_{nm}^{\pm} A_{ml}^{\pm} (1-(-1)^n e^{ik_m^{\pm} b}),$$

$$B_{nm}^{\pm} = \frac{\pi^2 mn}{d_{\pm} ((n\pi)^2 - (bk_n^{\pm})^2)}, \quad X_n = \sum_{m=1}^{\infty} 2B_{nm}^+ (a_m (1-(-1)^n e^{ik_m^+ b}) + d_m (1-(-1)^n e^{-ik_m^+ b})),$$

$$Y_n = \sum_{m=1}^{\infty} 2(-1)^m B_{nm}^- (g_m (1-(-1)^n e^{ik_m^- b}) + d_m (1-(-1)^n e^{-ik_m^- b})).$$

Заметим также, что в случае $L=0$ данная система преобразуется к более простому виду:

$$\begin{cases} t_n \Phi^+(d_-, k'_n) = w_n \Phi^-(d_-, k'_n), \\ i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^+ t_l + X_n + t_n \varphi^+(d_-, k'_n) = i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^- w_l + Y_n + w_n \varphi^-(d_-, k'_n). \end{cases}$$

Для численных вычислений бесконечные суммы ограничиваются некоторой константой N , в рамках которой и производятся вычисления. Матрица, соответствующая исходной системе уравнений, в силу большого размера имеет гораздо более плохую обусловленность, что негативно сказывается при численном решении. Плохая обусловленность вызвана волновыми функциями, соответствующими комплексным значениям энергии k_n^{\pm} и k'_n . Скорее всего, при аналитическом решении бесконечной системы, соответствующие коэффициенты системы должны обращаться в ноль.

Заметим, что после построения системы появляется возможность решения ряда задач.

Во-первых, появляется возможность решить задачу рассеяния. Для этого положим $a_n = \delta_{n1}$, а d_n , g_n и q_n тождественно равными нулю. Решив систему и найдя выходные параметры b_n , c_n , h_n и p_n , коэффициенты прохождения определяются исходя из формул:

$$T_{12} = \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 k_n^+ / k_1^+, \quad T_{11} = \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 k_n^+ / k_1^+, \\ T_{14} = \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} |p_n|^2 k_n^- / k_1^-, \quad T_{13} = \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} |h_n|^2 k_n^- / k_1^-.$$

Во-вторых, облегчается поиск связанных состояний. Для этого некоторый выбранный параметр (например, L или k) варьируется в некоторых пределах для достижения нулевого значения определителя матрицы (1). В этом случае система при нулевых векторах начальных условий имеет ненулевое решение, которое и определяет соответствующую собственную функцию.

Анализ системы без внешнего электрического поля

В случае отсутствия внешних полей в области окна, разумно рассматривать набор функций $\Phi^\pm(y, k_n)$ как граничные составляющие собственных функций потенциальной ямы шириной $(d_+ + L + d_-)$:

$$\Phi^+(y, k_n) = \sin(k_n(y - d_+ - L - d_-)), \\ \Phi^-(y, k_n) = \sin(k_n y).$$

Соответствующие константы A_{nm}^\pm :

$$A_{nm}^+ = -\frac{mn\pi^2 \sin(k'_m d_+)}{bk_n^+ ((n\pi)^2 - (d_+ k'_m)^2)}, \\ A_{nm}^- = -(-1)^n \frac{mn\pi^2 \sin(k'_m d_-)}{bk_n^- ((n\pi)^2 - (d_- k'_m)^2)}.$$

Пусть, в секторе VII будет потенциальный барьер высотой V , тогда функция Φ будет иметь вид:

$$\Phi(y, k'_n) = f_n e^{ik''_n y} + e_n e^{-ik''_n y}, \\ \phi(y, k'_n) = ik''_n (e^{ik''_n y} - e_n e^{-ik''_n y}),$$

$$\text{где } k''_n = \sqrt{(k'_n)^2 - V} = \sqrt{k_n^2 - (n\pi/b)^2 - V}.$$

Перепишем систему (1), используя выбранную систему функций:

$$\begin{cases} i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^+ t_l + X_n + k'_n t_n \cos(k'_n d_+) + k''_n \frac{\sin(k'_n d_-)}{\sin(k'_n L)} (t_n \cos(k''_n L) + w_n) = 0, \\ i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl}^- w_l + Y_n + k'_n w_n \cos(k'_n d_-) + k''_n \frac{\sin(k'_n d_-)}{\sin(k'_n L)} (t_n + w_n \cos(k''_n L)) = 0. \end{cases}$$

Пусть $R_n = k'_n \cos(k'_n d_-) + k''_n (k'_n L) \sin(k'_n d_-)$.

В случае $d_+ = d_- = d$ (соответственно, $C_{nl}^+ = C_{nl}^- = C_{nl}$) система допускает разделение переменных. Обозначим $U_n = t_n + w_n$ и $V_n = t_n - w_n$, тогда:

$$\begin{cases} i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl} U_n + (X_n + Y_n) + R_n U_n + k''_n \frac{\sin(k'_n d)}{\sin(k'_n L)} U_n = 0, \\ i \sum_{l=1}^{\infty} C_{nl} V_l + (X_n - Y_n) + R_n V_n - k''_n \frac{\sin(k'_n d)}{\sin(k'_n L)} V_n = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Численное моделирование

Было проведено численное моделирование для случая отсутствия внешних полей (рис. 2). Даже в таком упрощенном случае в зоне взаимодействия, функции коэффициентов прохождения в зависимости от параметров системы являются сложными и мало предсказуемыми. Само моделирование происходило на основе решения системы (2).

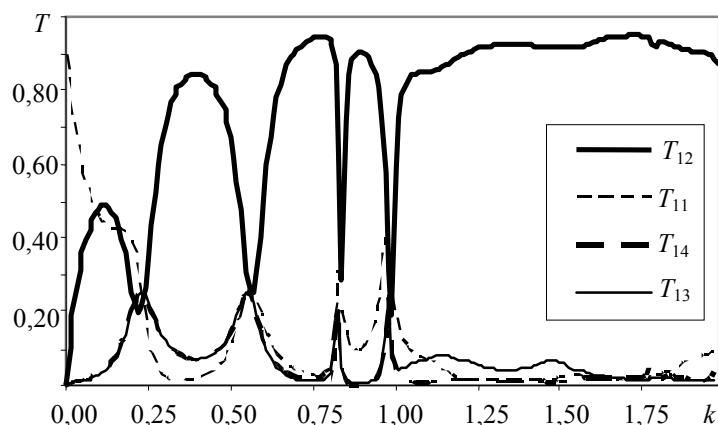


Рис. 2. Зависимость коэффициентов прохождения от энергии для системы с $V = 0$, $L = d = b$

Варьируя параметры системы, можно получить ярко выраженный резонанс (рис. 3). Данный результат хорошо согласуется с аналитическими результатами, полученными в [6, 7].

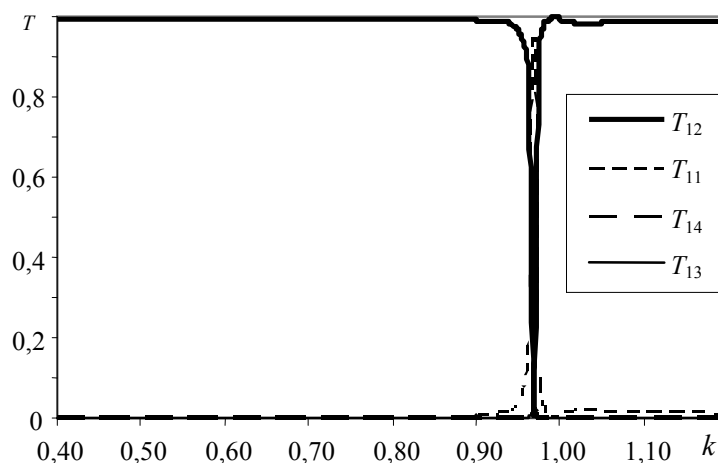


Рис. 3. Эффект полного отражения в системе с $V = 2,8$, $L = d$, $b = 0,4d$

Заключение

Произведено построение математической модели системы связанных волноводов. Ее использование позволяет существенно экономнее и быстрее по сравнению с другими вычислительными методами получать зависимость коэффициентов прохождения от геометрических и энергетических параметров системы. Это позволяет подобрать необходимые характеристики для требуемого в конкретных задачах поведения системы. В дальнейшем, данную модель планируется адаптировать для поиска стационарных состояний волновой функции системы.

Литература

1. Фейнман Р. Моделирование физики на компьютерах // Квантовый компьютер и квантовые вычисления. – Ижевск, 1999. – Т. 2. – 96 с.
2. Валиев К.А., Кокин А.А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. – М.: R&C Dynamics, 2001. – 358 с.
3. Gavrilov M.I., Gortinskaya L.V., Pestov A.A., Popov I.Yu., Tesovskaya E.S. Quantum Algorithms Implementation Using Quantum Wires System // Proceedings of the ICO Topical Meeting on Optoinformatics Information Photonics 2006, September 4–7. – SPb, Russia, 2006. – P. 327–329.
4. Popov I.Yu., Gortinskaya L.V., Gavrilov M.I., Pestov A.A., Tesovskaya E.S. Weakly coupled quantum wires and layers as an element of quantum computer // Письма в ЭЧАЯ. – 2007. – Т. 4. – № 2(138). – С. 237–243.

5. Abramowitz M., Stegun I.A. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. – 10th edition. – New York: Dover Publications, 1972. – P. 1046.
6. Exner P. and P. Seba. Bound states in curved quantum waveguides // J. Math. Phys. – 1989. – V. 30. – № 11. – P. 2574–2580.
7. Gortinskaya L.V., Popov I.Yu., Tesovskaya E.S. // Proc. of Intern. Seminar @Day on Diffraction' 2003. – SPb, 2003. – P. 52.

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