

## Теоретическая физика

УДК 51:530.145

### ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ ТРЁХМЕРНОГО КВАНТОВОГО КОЛЬЦА В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**А. А. Брызгалов, Ф. И. Карманов**

Обнинский институт атомной энергетики – филиал НИЯУ МИФИ  
(Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»),  
249040, Обнинск, Калужская обл., ул. Студгородок, 1.

E-mails: sandro185@mail.ru, fikarm@yandex.ru

*Рассматривается трёхмерная осесимметричная точнорешаемая модель квантового кольца в постоянном магнитном поле. Используемый потенциал ограничивает движение в системе по двум направлениям. С помощью метода расщепления по физическим факторам получены волновые функции электронов, а также значения для квазистационарных уровней энергии. Приводится качественное объяснение поведения волнового пакета в квантовом кольце, пронизываемом переменным магнитным полем.*

**Ключевые слова:** квантовое кольцо, метод расщепления по физическим факторам, магнитное поле, временная динамика.

**Введение.** Низкоразмерные структуры, такие как квантовые точки и квантовые кольца, представляют большой интерес для исследований как с теоретической [1], так и с практической точки зрения [2]. Современные технологические возможности позволяют получать подобные наноструктуры различной формы и различных геометрических размеров. К сожалению, большинство теоретических моделей квантовых колец описывают движение электронов на двумерной плоскости. Тем не менее имеются работы, посвященные компьютерному моделированию трёхмерных квантовых колец. В работе [3] получены уровни энергии, проанализировано влияние формы кольца, влияние изменения радиуса кольца и другие эффекты.

В данной работе предлагается рассмотреть вопросы моделирования временной динамики трёхмерного квантового кольца. Знание явного вида волновых функций и уровней энергии важно при исследовании спектров излучения и поглощения в пространственно ограниченных квантовых кольцах, находящихся в магнитном поле.

Как было показано в предыдущих работах [4] и [5], метод расщепления по физическим факторам является удачным инструментом для решения подобных задач для двумерного случая с потенциалом  $V(r) = a_1/r^2 + a_2r^2 - V_0$ .

---

*Александр Анатольевич Брызгалов, аспирант, каф. общей и специальной физики. Фёдор Иванович Карманов (к.ф.-м.н., доц.), доцент, каф. общей и специальной физики.*

Использование данного потенциала было предложено в работе [6]. Если модифицировать вид потенциала следующим образом (см. рис. 1):

$$V(r, z) = a_1/r^2 + a_2 r^2 + a_3 z^2/2 - V_0, \quad (1)$$

то, применяя метод расщепления по физическим факторам, можно получить аналитическое решение нестационарного уравнения Шрёдингера на временном слое.

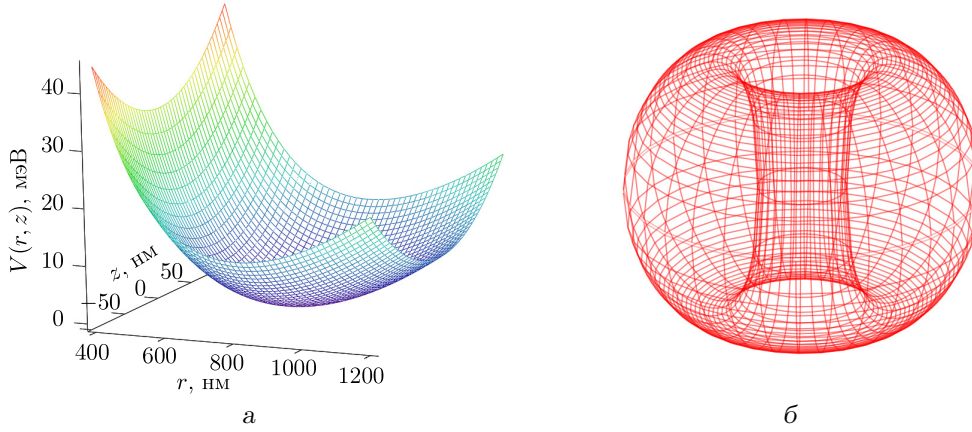


Рис. 1. Потенциал трёхмерного квантового кольца (а) и эквипотенциальная поверхность (б), соответствующая энергии 40 мэВ. Следующие параметры модели описывают кольцо GaAs с радиусом  $r_0 = 800$  нм:  $a_1 = 9,1022 \cdot 10^6$  мэВ нм<sup>2</sup>,  $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5}$  мэВ нм<sup>-2</sup>,  $a_3 = 28,443$  мэВ нм<sup>-2</sup>,  $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$ , эффективная масса электрона  $\mu = 0,067\mu_e$  ( $\mu_e$  — масса электрона)

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим электрон с зарядом  $e$  и массой  $\mu$ , находящийся в трёхмерном квантовом кольце. На движение электрона влияет действие потенциала (1) и переменное магнитное поле с напряженностью  $H(t)$ , которая зависит от времени. Необходимо решить нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( p + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(r, z) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Здесь  $p$  — оператор импульса,  $c$  — скорость света, а  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \{0, H(t)r/2, 0\}$  — вектор-потенциал.

Энергетические квазистационарные уровни системы  $E(t)$  могут быть получены из задачи на собственные значения  $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = E(t)\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Квазистационарность обусловлена тем, что в процессе изменения магнитного поля на электроны действует вихревое электрическое поле.

**2. Метод решения.** Выполним переход в цилиндрическую систему координат и разделим переменные согласно следующему представлению волновой функции:

$$\Psi(r, \theta, z, t) = \psi(r, z, t) \exp(im\theta) / \sqrt{2\pi r}.$$

В результате получим начально-краевую задачу следующего вида:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi(r, z, t)}{\partial t} &= \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{4r^2} + \left( \frac{m}{r} - \frac{r \cdot eH(t)}{2\hbar c} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(r, z) \right) \psi(r, z, t); \\ \psi(0, z, t) &= \psi(\infty, z, t) = \psi(r, -\infty, t) = \psi(r, \infty, t) = 0; \\ \psi(r, z, 0) &= A_0 \cdot \exp \left( -\frac{(r - r_0)^2}{2\sigma_r^2} \right) \exp \left( -\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $r_0, z_0, \sigma_r, \sigma_z$  — константы, определяющие начальную форму волнового пакета;  $A_0 = 1/(2\pi\sigma_r\sigma_z)$ ;  $m$  — квантовое число углового момента. Кроме того, было произведено обезразмеривание с учётом  $\hbar = 2\mu = 1$ .

Данную систему уравнений можно решить по аналогии с двухмерным случаем [4]. Применяя метод расщепления по физическим факторам, получим две задачи упрощенного типа. Это система уравнений, отвечающая взаимодействию с потенциалом:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi^{RZ}}{\partial t} &= \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\tilde{a}_1 - 0,25 + m^2}{r^2} + \frac{\tilde{a}_3 z^2}{2} - \tilde{V}_0 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi^{RZ}; \\ \psi^{RZ}(t_k) &= \psi^H(t_k); \quad \psi^{RZ}(0) = \psi^{RZ}(\infty) = \psi^{RZ}(-\infty) = \psi^{RZ}(\infty). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\tilde{a}_1 = a_1/(\hbar^2/(2\mu))$ ,  $\tilde{a}_2 = a_2/(\hbar^2/(2\mu))$ ,  $\tilde{a}_3 = a_3/(\hbar^2/(2\mu))$ ,  $\tilde{V}_0 = V_0/(\hbar^2/(2\mu))$ . Вторая система уравнений — система, отвечающая взаимодействию с магнитным полем:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi^H}{\partial t} &= - \left( \frac{m \cdot eH(t)}{\hbar c} - \frac{r^2 e^2 H(t)^2}{4(\hbar c)^2} \right) \psi^H; \\ \psi^H(t = 0) &= A_0 \cdot \exp \left( -\frac{(r - r_0)^2}{2\sigma_r^2} \right) \exp \left( -\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

При решении задачи (3) полагается, что  $\psi^{RZ}(r, z, t) = R(r)Z(z)T(t)$ . Соответствующие уравнения и решения выписаны в нижеследующей таблице.

| Уравнение                                                                                                                                           | Решение                                                                                                    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\tilde{a}_1 - 0,25 + m^2}{r^2} + \tilde{a}_2 r^2 - \tilde{V}_0 \right) R(r) = \tilde{E}_{qr} R(r)$ | $R(r) = B \left( \frac{r}{\lambda} \right)^{(M+1)} {}_1F_1 \left( -n, M+1, \frac{r^2}{2\lambda^2} \right)$ |
| $\left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\tilde{a}_3 z^2}{2} \right) Z(z) = \tilde{E}_{os} Z(z)$                                             | $Z(z) = A \cdot H_n \left( \frac{z}{b} \right) \exp \left( -\frac{z^2}{2b^2} \right)$                      |
| $i \frac{\partial T}{\partial t} = E_n T(t)$                                                                                                        | $T(t) = T_0(t_k) \exp(-iE_n(t - t_k))$                                                                     |

Здесь использованы следующие обозначения:  $\lambda = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$ ,  $M = \sqrt{m^2 + \tilde{a}_1}$ ,  $\omega = \sqrt{e^2 H(t)^2/\mu^2 + 8a_2/\mu}$ ,  $\omega_{os} = \sqrt{\tilde{a}_3/\mu}$ ,  $b = \sqrt{\hbar/(\mu\omega_{os})}$ ;  ${}_1F_1$  — вырожденная гипергеометрическая функция [8],  $H_n$  — полиномы Эрмита [8],  $A$  и  $B$  — некоторые константы.

Решение (4) получается как решение линейного однородного уравнения первого порядка [7] на отрезке  $t \in [t_{k-1}, t_k]$  с начальным условием, следующим из решения задачи (3) в момент  $t_{k-1}$ :

$$\psi^H(t_k) = \psi^{RZ}(t_{k-1}) \exp \left( -i \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{m \cdot eH(t)}{\hbar c} - \frac{r^2 e^2 H(t)^2}{4(\hbar c)^2} dt \right).$$

Таким образом, общее решение (2) такое:

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, t_k) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{n,m} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^{(M+1)} {}_1F_1\left(-n, M+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right) \exp(im\theta) \times \\ \times H_n\left(\frac{z}{b}\right) \exp\left(\frac{-z^2}{2b^2}\right) \exp(-iE_n(t-t_k)) \times \\ \times \exp\left(-i \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{m \cdot eH(t)}{\hbar c} - \frac{r^2 e^2 H(t)^2}{4(\hbar c)^2} dt\right). \end{aligned}$$

Здесь  $C_{n,m}$  — нормировочный коэффициент, получаемый из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(r, z, t) \psi^*(r, z, t) dr dz = 1.$$

Уровни энергии могут быть получены из условий ограниченности гипергеометрической функции и полиномов Эрмита. Итоговое выражение представляет собой сумму энергий для квантового кольца и гармонического осциллятора:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{n,m} = \tilde{E}_{qr} + \tilde{E}_{os} = \\ = (n + 1/2 + M(m)/2) \hbar \omega - m \hbar \omega_c / 2 - \mu \omega_0^2 r_0^2 + (n + 1/2) \hbar \omega_{os}, \end{aligned}$$

где  $\omega_c = eH(t)/\mu$  и  $\omega_0 = \sqrt{8a_2/\mu}$ .

**3. Результаты.** Полученные волновые функции и значения для уровней энергии могут быть использованы для расчетов временной динамики. В работе [5] было проанализировано движение волнового пакета для различных случаев (слабое, сильное и переменные магнитные поля). Очевидно, что для поставленной задачи влияние магнитного поля на движение вдоль оси  $r$  будет идентичным. А по оси  $z$  будет наблюдаться движение в гармоническом потенциале с некоторым периодом  $T_{os} = 2\pi/\omega_{os}$ .

На рис. 2 продемонстрирован пример визуализации расчета временной динамики для случая переменного магнитного поля. Здесь показаны линии уровней плотности вероятности в зависимости от времени для потенциалов, отвечающих движению по различным направлениям. Поведение волнового пакета легко интерпретируется при рассмотрении влияния эффективных потенциалов по отдельным осям  $r$  и  $z$  (см. рис. 3). Как видно, для движения вдоль оси  $r$  характерно колебательное движение со смещением к внутренней части кольца. Такое поведение обусловлено выбором зависимости магнитного поля  $H(t) = H_0 \exp(1 - \alpha t)$ , где  $\alpha = 1/T_0 = \omega_0/(2\pi)$  и  $H_0 = 10^4$  Гаусс. На движение вдоль оси  $z$  магнитное поле влияния не оказывает, поэтому наблюдается стандартная картина колебаний во времени.

Как отмечалось в [4], использование метода расщепления по физическим факторам позволяет получить существенно более точные результаты по сравнению с традиционными численными методами (например, методом стрельбы или прогонки).

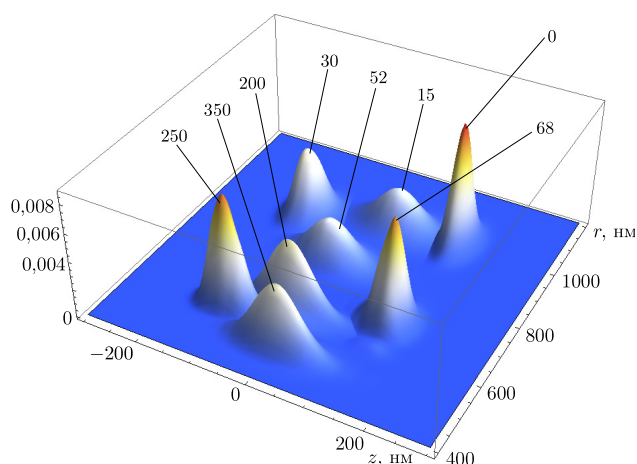


Рис. 2. Плотности вероятностей, отвечающие нахождению электронов в пространстве в различные моменты времени: цифры — номера итераций по времени; величина одной итерации соответствует  $(1/350)2\pi/\omega$ ; параметры волнового пакета в начальный момент времени следующие:  $r_0 = 1000$  нм,  $z_0 = 200$  нм,  $\sigma_r = 50$ ,  $\sigma_z = 16$

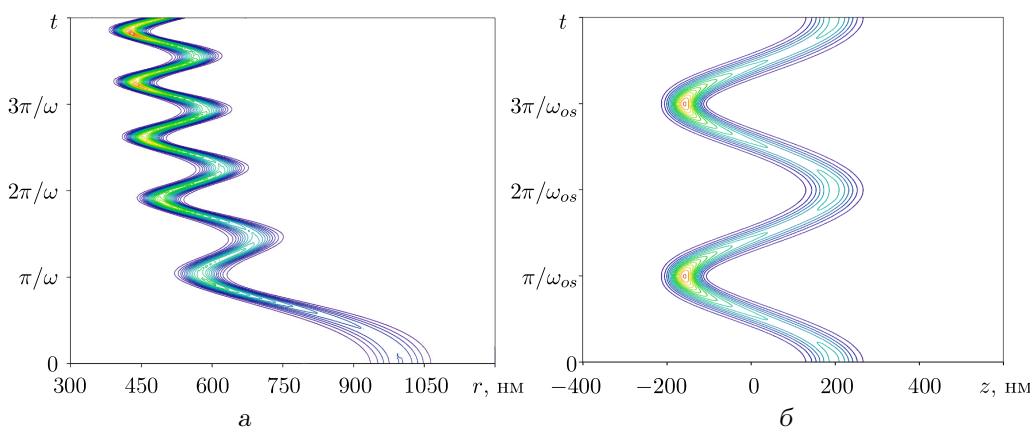


Рис. 3. Качественное поведение волновых функций:  
а)  $V_r(r) = a_1/r^2 + a_2r^2 - V_0$ ; б)  $V_z(z) = a_3r^2/2$

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Vieffers S., Koskinen P., Singha Deo P., Manninen M.* Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents // *Physica E*, 2004. Vol. 21, no. 1. Pp. 1–35.
2. *Timm R., Eisele H., Lenz A., Ivanova L., Balakrishnan G., Huffaker D. L., Dahne M.* Self-organized formation of GaSb/GaAs quantum rings // *Phys. Rev. Lett.*, 2008. Vol. 101, no. 25, 256101. 4 pp.
3. *Li Y., Voskoboynikov O., Lee C. P.* Computer simulation of electron energy states for three-dimensional InAs/GaAs semiconductor quantum rings / In: *Technical Proceedings of the 2002 International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems* / Nanotech, 1, 2002. Pp. 540–543.
4. *Брызгалов А. А., Карманов Ф. И.* Метод расщепления по физическим факторам в задаче о временной динамике волновых функций электронов двумерного квантового кольца // *Матем. моделирование*, 2010. Т. 22, № 6. С. 15–26; англ. пер.: *Bryzgalov A. A.,*

- Karmanov F. I.* Method for splitting into physical processes in the problem on the time dynamics of electron wave functions of a two-dimensional quantum ring // *Matem. Mod. Comp. Simul.*, 2010. Vol. 3, no. 1. Pp. 25–34.
5. Брызгалов А. А., Карманов Ф. И. Двумерное квантовое кольцо: влияние магнитного поля на временную динамику волновых функций электронов // *Изв. вуз. Физика*, 2010. № 3/2. С. 31–36. [*Bryzgalov A. A., Karmanov F. I.* 2D quantum ring: magnetic field influence to the time dynamics of the electron wave functions // *Izv. vuz. Fizika*, 2010. no. 3/2. Pp. 31–36].
6. *Tan W.-C., Inkson J. C.* Electron states in two-dimensional ring — an exactly soluble model // *Semicond. Sci. Technol.*, 1996. Vol. 11, no. 11. Pp. 1635–1641.
7. *Kamke E.* Differentialgleichungen. Lösungsmethoden und Lösungen. Vol. I: Gewöhnliche Differentialgleichungen / 3rd edition (German). New York: Chelsea, 1948. 666 pp.; русск. пер.: Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971. 576 с.
8. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables / reprint of the 1972 edition; eds. M. Abramowitz, I. Stegun. New York: Dover Publications, 1992. 1046 pp.; русск. пер.: Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.

Поступила в редакцию 20/XII/2010;  
в окончательном варианте — 11/II/2011.

MSC: 81V65

## TIME DYNAMICS OF ELECTRON WAVE FUNCTIONS OF 3D QUANTUM RING IN ALTERNATING MAGNETIC FIELD

*A. A. Bryzgalov, F. I. Karmanov*

“National Research Nuclear University MPEI”  
Obninsk State Technical University,  
1, Studgorodok, Obninsk, Kaluga region, 249040, Russia.  
E-mails: sandro185@mail.ru, fikarm@yandex.ru

*Three-dimensional axially symmetrical exactly soluble model of quantum ring has been considered in the constant magnetic field. Potential, which restricts particle movement in the system in two directions, has been used. By applying method of splitting into physical processes, an electron wave functions and a quasi-stationary energy levels values have been obtained. Also a qualitative description of wave packet movement has been given for the case of quantum ring threading by alternating magnetic field.*

**Key words:** quantum ring, method of splitting into physical interactions, magnetic field, time dynamics problem.

Original article submitted 20/XII/2010;  
revision submitted 11/II/2011.

---

*Alexander A. Bryzgalov*, Postgraduate Student, Dept. of General and Special Physics.  
*Fedor I. Karmanov* (Ph.D. (Phys. & Math.)), Associate Professor, Dept. of General and Special Physics.